

Rec'd PCT/PTO 15 OCT 2004

PCT/JPC3/04908

日本国特許庁 17.04.03  
JAPAN PATENT OFFICE

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office

出願年月日  
Date of Application:

2002年 5月16日

出願番号  
Application Number:

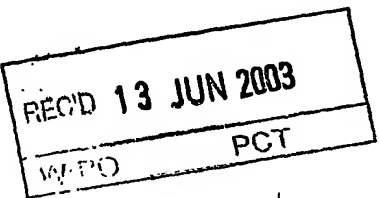
特願2002-141657

[ST.10/C]:

[JP2002-141657]

出願人  
Applicant(s):

武田薬品工業株式会社

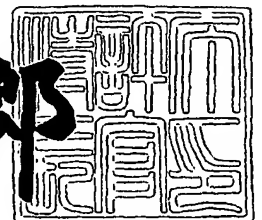


PRIORITY DOCUMENT  
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN  
COMPLIANCE WITH  
RULE 17.1(a) OR (b)

2003年 5月27日

特許庁長官  
Commissioner,  
Japan Patent Office

太田信一郎



出証番号 出証特2003-3039466

【書類名】 特許願

【整理番号】 B02154

【提出日】 平成14年 5月16日

【あて先】 特許庁長官 殿

【国際特許分類】 A61K 31/445

【発明者】

    【住所又は居所】 大阪府泉南郡熊取町桜が丘2丁目23番地10

    【氏名】 高島 勝典

【発明者】

    【住所又は居所】 京都府向日市寺戸町殿長31番地20

    【氏名】 飯澤 祐史

【発明者】

    【住所又は居所】 兵庫県尼崎市塚口町4丁目33番地26

    【氏名】 白石 充

【発明者】

    【住所又は居所】 奈良県生駒市鹿ノ台北3丁目11番地2

    【氏名】 杉原 芳博

【発明者】

    【住所又は居所】 鹿児島県鹿児島市皇徳寺台3丁目54番地19

    【氏名】 馬場 昌範

【特許出願人】

    【識別番号】 000002934

    【氏名又は名称】 武田薬品工業株式会社

【代理人】

    【識別番号】 100114041

    【弁理士】

    【氏名又は名称】 高橋 秀一

【選任した代理人】

    【識別番号】 100106323

【弁理士】

【氏名又は名称】 関口 陽

【先の出願に基づく優先権主張】

【出願番号】 特願2002-118055

【出願日】 平成14年 4月19日

【整理番号】 B02126

【手数料の表示】

【予納台帳番号】 005142

【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【包括委任状番号】 9909276

【包括委任状番号】 0203423

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物を含有する輸血時および血液製剤使用時におけるHIV感染症予防剤

【特許請求の範囲】

【請求項1】 CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物を含有することを特徴とする輸血時および血液製剤使用時におけるHIV感染症予防剤。

【請求項2】 CCR (CCケモカイン受容体) がCCR5および/またはCCR2である請求項1記載の予防剤。

【請求項3】 CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物がN-(3,4-ジクロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-N-{3-[4-(4-[(メチルスルホニル)アミノ]フェニル)スルホニル]-1-ピペリジニル}プロピル}-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-クロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-N-(3-{4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-{4-[4-(アミノカルボニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-(3,4-ジクロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、1-アセチル-N-(3-{4-[4-(アミノカルボニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-(3-クロロ-4-メチルフェニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(エチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(イソプロピルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-クロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(イソプロピルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-クロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(エチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-N-(3-{4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-{4-[4-(アミノカルボニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-(3-クロロ-4-メチルフェニル)-1-(メチルスルホ



ニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-N'-(4-クロロフェニル)-N-フェニルウレア、N'-(4-クロロフェニル)-N-[3-[4-(4-フルオロベンジル)-1-ピペリジニル]プロピル]-N-フェニルウレア、N'-(4-クロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(4-モルホリニルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-フェニルウレア、N'-(4-クロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(4-メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-フェニルウレア、4-{[1-(3-{[(4-クロロアニリノ)カルボニル]アニリノ}プロピル)-4-ピペリジニル]メチル}ベンズアミド、N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-N-(3,4-ジクロロフェニル)-1-メチル-5-オキソ-3-ピロリジンカルボキサミド、1-ベンジル-N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-5-オキソ-N-フェニル-3-ピロリジンカルボキサミド、N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-1-(2-クロロベンジル)-5-オキソ-N-フェニル-3-ピロリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-{3-[4-(4-フルオロベンジル)-1-ピペリジニル]プロピル}-1-メチル-5-オキソ-3-ピロリジンカルボキサミドおよびN-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-5-オキソ-N-フェニル-1-(2,2,2-トリフルオロエチル)-3-ピロリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-2-[1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジニル]アセトアミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(イソプロピルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-2-[1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジニル]アセトアミド、3-(1-アセチル-4-ピペリジニル)-N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)プロパンアミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-4-ヒドロキシ-1-(メチルスルホニル)-N-(3-{4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-4-ピペリジンカルボキサミドまたはその塩である請求項1記載の予防剤。

【請求項4】 CCR (CCケモカイン受容体)拮抗作用を有する化合物がヨウ化N-メチル-N-[4-[[2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]ピペリジニウム、ヨウ化 N-メチル-N-[4-[[7-(4-メチルフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]ピペリジニウム、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒド

ロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-7-(4-メチルフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-カルボキサミド、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-7-(4-ホルホルノフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-カルボキサミド、7-(4-エトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-カルボキサミド、ヨウ化 N,N-ジメチル-N-[4-[[2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アンモニウム、ヨウ化 N-メチル-N-[4-[[7-(4-メチルフェニル)-3,4-ジヒドロナフタレン-2-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]ピペリジニウム、塩化 N,N-ジメチル-N-(4-((2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウム、塩化 N,N-ジメチル-N-(((7-(4-メチルフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N-(4-オキソシクロヘキシル)アンモニウム、塩化 N-(4-(((7-(4-エトキシフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N,N-ジメチル-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウム、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-7-(4-プロポキシフェニル)-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(4-ブトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-[N-メチル-N-(2-プロポキシエチル)アミノ]フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-(2-エトキシエトキシ)フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-(2-ブトキシエトキシ)フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2

,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-(2-エトキシエトキシ)-3,5-ジメチルフェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[2-クロロ-4-(2-プロポキシエトキシ)フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(3-メチル-4-プロポキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(3,4-ジプロポキシフェニル)-N-(4-((N-メチル-N-(テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イル)アミノ)メチル)フェニル)-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(4-エトキシエトキシフェニル)-1-エチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-エチル-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-エチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-エトキシエトキシフェニル)-1-ホルミル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-ホルミル-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-ホルミル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-プロピル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-1-プロピル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-ベンジル-7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-

N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-シクロブピルメチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-フェニル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(3,4-メチレンジオキシ)フェニル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(2-メチルオキサゾール-5-イル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-アリル-7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(3-チエニル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(チアゾール-2-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(1-メチルピラゾール-4-イル)メチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(3-メチルイソチアゾール-5-イル)メチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(1-エチルピラゾール-4-イル)メチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-イソブチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-イソブチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒド

ロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(チアゾール-5-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(1-メチルテトラゾール-5-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミドおよび7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(2-メチルテトラゾール-5-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミドからなる群から選ばれた化合物またはその塩である請求項1記載の予防剤。

【請求項5】 CCR (CCケモカイン受容体)拮抗作用を有する化合物を含有してなる輸血用血液または血液製剤。

【請求項6】 CCR (CCケモカイン受容体)拮抗作用を有する化合物を含有してなる輸血用血液または血液製剤を投与することを特徴とするHIV感染を予防する方法。

【請求項7】 輸血時または血液製剤使用時に有効量のCCR (CCケモカイン受容体)拮抗作用を有する化合物を投与することを特徴とするHIV感染を予防する方法。

【請求項8】 輸血時または血液製剤使用時が輸血または血液製剤使用時の1時間前ないし同時である請求項7に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、CCR (CCケモカイン受容体)拮抗作用を有する化合物を含有してなる輸血時および血液製剤使用時におけるHIV感染症予防剤に関する。

【0002】

【従来の技術】

HIV-1はCD4陽性T細胞に感染する際にG蛋白結合型受容体 (G-protein

coupled receptor: GPCR) の一種である CCR5 および / または CXCR4 をコレセプターとして利用する (Science 272, 872-877(1996); Nature 381, 661-666(1996); Nature 381, 667-673(1996); Science 272, 1955-1958(1996); Cell 85, 1135-1148(1996); Cell 85, 1149-1158(1996))。CCR5 および CXCR4 以外にも CCR2 (Cell 87, 437-446(1996))、CCR3 (Cell 85, 1135-1148(1996))、APJ (J.Virol. 72, 6113-6118(1998))、ChemR23 (Eur.J. Immunol. 28, 1689-1700(1998))、GPR1、GPR15 / BOB (J.Exp.Med. 186, 405-411(1997))、STRL33 / BONZO (J.Exp.Med. 185, 2015-2023(1997)) などの GPCR もコレセプターとして利用され得ることが見出されているが、CCR5 および CXCR4 以外のコレセプターについては実際の HIV 感染発症との関連性は不明である。HIV-1 はコレセプターの利用能により CCR5 をコレセプターとして利用するものは R5 HIV-1、CXCR4 をコレセプターとして利用するものは X4 HIV-1、その両方をコレセプターとして利用しているものは R5X4 HIV-1 と呼ばれる (Nature 391, 240(1998))。

HIV-1 のコレセプター利用能と HIV 感染症の病態には密接な関係があることが知られている。すなわち、初感染は R5 HIV-1 によって引き起こされ、AIDS 発症までの無症候性期には R5 HIV-1 が主に分離され、AIDS 期に近づくにつれて次第に R5X4 HIV-1 や X4 HIV-1 が有意に分離されるようになる (J.Virol. 66, 1354-1360(1992); J.Infect.Dis. 169, 968-974(1994); J.Exp.Med. 185, 621-628(1997))。

日本における献血者の HIV スクリーニング検査における HIV 検査陽性例は平成 12 年には献血者数約 590 万例に対して 67 例であることが報告されている。このうち 3 例については抗体検査陰性で遺伝子検査陽性の感染初期例であり、これらはいわゆる window 期 (HIV に感染してから抗体が陽性と検出されるまでの期間) に献血されたものと考えられる (総合臨床 50, 2698-2703(2001))。また、抗体スクリーニング検査開始以降現在までに輸血による感染が否定できない感染例も報告されており、これらは window 期に献血された血液の輸血が原因ではないかと考えられている (Mebio 15, 6-11(1999))。抗体検査

では22日間であったwindow期が遺伝子検査の導入により11日間に短縮されるものの、なお11日間のwindow期が残るために検査のみでは献血血液による輸血感染を完全には防止することが出来ず、今後もwindow期の献血血液による輸血感染例が増大する可能性が危惧される。また、多人数の血漿や血清をプールして製造されている輸入品の標準管理血清や免疫グロブリン製剤などの血液製剤についても同様の理由で今後も感染源としての可能性を否定できない。

輸血および血液製剤使用時におけるHIV感染ではウイルスが血中に直接侵入してCD4陽性リンパ球に感染するが、その際にウイルスはCCR5のようなCCRをコレセプターとして利用する。したがって、コレセプターへのウイルスの結合を阻害し、宿主細胞へのウイルスの侵入を阻止できるような化合物、たとえばCCR拮抗作用を有する化合物は輸血および血液製剤使用時におけるHIV感染症を予防できると考えられる。一方、既存の抗HIV薬である逆転写酵素阻害薬やプロテアーゼ阻害薬はウイルスが宿主細胞に侵入した後の過程で作用することから感染予防という意味での効果はあまり期待できない。本発明者らは、これまでにCCR5拮抗作用を有するTAK-779がR5 HIV-1によって引き起こされるHIV-1感染に対して感染阻止効果を示すことを報告している(Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 96, 5698-5703(1999))。また、日本人の血友病患者における長期未発症者およびHIV抗体陰性者のケモカインレセプターの遺伝子多型が調べられており、このようなハイリスクファクターグループにおけるCCR2-64I/CCR5-59653Tの遺伝子多型がAIDS発症阻止ばかりでなく、HIV感染の阻止にも関与していることが報告された(第15回日本エイズ学会(2001年12月)発表)。CCR5および/またはCCR2がHIV感染成立に重要な役割を果たしていることが示唆される。

一方、CCR拮抗作用を有する化合物としては、種々知られている。しかしながら、CCR拮抗作用を有する化合物が、輸血および血液製剤使用時におけるHIV感染症を予防するという報告はなされていない。

【0003】

【発明が解決しようとする課題】

本発明は、輸血時および血液製剤使用時におけるH I V感染症予防において、格別に顕著な効果を発揮する新規薬剤を提供するものである。

【 0 0 0 4 】

【課題を解決するための手段】

w i n d o w 期に献血あるいは供血された血液中に混入しているH I Vはスクリーニング検査によっても検出されない可能性があり、その結果として輸血時および血液製剤使用時にそのレシピエントにおいてH I V感染が引き起こされる可能性が考えられるため、本発明者らは、CCR拮抗作用を有する薬物がH I V感染予防薬として働き得る可能性があることに着目し、種々検討した結果、CCR 5拮抗薬が輸血時および血液製剤使用時におけるH I V感染症予防に有用であることを見出し、本発明を完成するに至った。

すなわち本発明は、

(1) CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物を含有することを特徴とする輸血時および血液製剤使用時におけるH I V感染症予防剤、

(2) CCR (CCケモカイン受容体) がCCR 5および／またはCCR 2であるである上記(1)記載の予防剤、

(3) CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物がN-(3,4-ジクロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-N-{3-[4-({4-[(メチルスルホニル)アミノ]フェニル}スルホニル)-1-ピペリジニル]プロピル}-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-クロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-N-(3-{4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-{4-[4-(アミノカルボニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-(3,4-ジクロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、1-アセチル-N-(3-{4-[4-(アミノカルボニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-(3-クロロ-4-メチルフェニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(エチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-{4-[4-(イソプロピルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-クロロフェニル)-N-(3-



[4-[4-(イソプロピルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-クロロフェニル)-N-(3-[4-[4-(エチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-1-(メチルスルホニル)-N-(3-[4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-(3-[4-[4-(アミノカルボニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-(3-クロロ-4-メチルフェニル)-1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジンカルボキサミド、N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-N'-(4-クロロフェニル)-N-フェニルウレア、N'-(4-クロロフェニル)-N-[3-[4-(4-フルオロベンジル)-1-ピペリジニル}プロピル]-N-フェニルウレア、N'-(4-クロロフェニル)-N-(3-[4-[4-(4-ホルホルニルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-フェニルウレア、N'-(4-クロロフェニル)-N-(3-[4-[4-(4-メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-N-フェニルウレア、4-{[1-(3-{[(4-クロロアニリノ)カルボニル]アニリノ}プロピル)-4-ピペリジニル}メチルベンズアミド、N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-N-(3,4-ジクロロフェニル)-1-メチル-5-オキソ-3-ピロリジンカルボキサミド、1-ベンジル-N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-5-オキソ-N-フェニル-3-ピロリジンカルボキサミド、N-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-1-(2-クロロベンジル)-5-オキソ-N-フェニル-3-ピロリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-[3-[4-(4-フルオロベンジル)-1-ピペリジニル}プロピル]-1-メチル-5-オキソ-3-ピロリジンカルボキサミドおよびN-[3-(4-ベンジル-1-ピペリジニル)プロピル]-5-オキソ-N-フェニル-1-(2,2,2-トリフルオロエチル)-3-ピロリジンカルボキサミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-[4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-2-[1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジニル]アセトアミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-[4-[4-(イソプロピルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)-2-[1-(メチルスルホニル)-4-ピペリジニル]アセトアミド、3-(1-アセチル-4-ピペリジニル)-N-(3,4-ジクロロフェニル)-N-(3-[4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル}プロピル)プロパンアミド、N-(3,4-ジクロロフェニル)-4-ヒドロキシ-1-(メチルスルホニル)-N

-(3-[4-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]-1-ピペリジニル]プロピル)-4-ピペリジンカルボキサミドまたはその塩である上記(1)記載の予防剤、

## 【0005】

(4) CCR (CCケモカイン受容体)拮抗作用を有する化合物がヨウ化 N-メチル-N-[4-[[[2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]ピペリジニウム、ヨウ化 N-メチル-N-[4-[[[7-(4-メチルフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]ピペリジニウム、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-7-(4-メチルフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-カルボキサミド、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-7-(4-モルホリノフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-カルボキサミド、7-(4-エトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-カルボキサミド、ヨウ化 N,N-ジメチル-N-[4-[[[2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アンモニウム、ヨウ化 N-メチル-N-[4-[[[7-(4-メチルフェニル)-3,4-ジヒドロナフタレン-2-イル]カルボニル]アミノ]ベンジル]ピペリジニウム、塩化 N,N-ジメチル-N-(4-(((2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウム、塩化 N,N-ジメチル-N-(((7-(4-メチルフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N-(4-オキシシクロヘキシル)アンモニウム、塩化 N-(4-(((7-(4-エトキシフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾオキセピン-4-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N,N-ジメチル-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウム、N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-7-(4-プロポキシフェニル)-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(4-ブトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノメチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-[N-メチル-N-(2-プロポキシエチル)アミノ]フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(

テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒ  
 ドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-(2-エトキシエトキシ)フェニ  
 ル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]  
 -1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、N-[4-[N-  
 メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-7-[4-(2-プロ  
 ポキシエトキシ)フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カ  
 ルボキサミド、7-[4-(2-ブトキシエトキシ)フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テト  
 ラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-  
 1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-[4-(2-エトキシエトキシ)-3,5-ジメチ  
 ルフェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イル)アミノ]メチ  
 ル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド  
 、7-[2-クロロ-4-(2-プロポキシエトキシ)フェニル]-N-[4-[N-メチル-N-(テト  
 ラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-  
 1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(3-メチル-4-プロポキシフェニル)-N-[  
 4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1,1-ジ  
 オキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド、7-(3,4-ジプロポキ  
 シフェニル)-N-(4-((N-メチル-N-(テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イル)アミノ)メチ  
 ル)フェニル)-1,1-ジオキソ-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾチエピン-4-カルボキサミド  
 、7-(4-エトキシエトキシフェニル)-1-エチル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒド  
 ロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-  
 カルボン酸アミド、1-エチル-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メ  
 チル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1  
 -ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-エ  
 チル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル  
 ]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-エトキシエトキ  
 シフェニル)-1-ホルミル-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミ  
 ノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-  
 ホルミル-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-N-[4-[N-メチル-N-(テトラヒド  
 ロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-

カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-ホルミル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-プロピル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-1-プロピル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-ベンジル-7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-シクロプロピルメチル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-フェニル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(3,4-メチレンジオキシ)フェニル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(2-メチルオキサゾール-5-イル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-アリル-7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(3-チエニル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(チアゾール-2-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(1-メチルピラゾール-4-イル)メチル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキ

シフェニル)-1-(3-メチルイソチアゾール-5-イル)メチル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-(1-エチルピラゾール-4-イル)メチル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-1-イソブチル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、1-イソブチル-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-5-イル)アミノ]メチル]フェニル]-7-(4-プロポキシエトキシフェニル)-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(チアゾール-5-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミド、7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(1-メチルテトラゾール-5-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミドおよび7-(4-ブトキシエトキシフェニル)-N-[4-[[N-メチル-N-(テトラヒドロピラン-4-イル)アミノ]メチル]フェニル]-1-(2-メチルテトラゾール-5-イル)メチル-2,3-ジヒドロ-1-ベンゾアゼピン-4-カルボン酸アミドからなる群から選ばれた化合物またはその塩である上記(1)記載の予防剤、

(5) CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物を含有してなる輸血用血液または血液製剤、

(6) CCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物を含有してなる輸血用血液または血液製剤を投与することを特徴とするHIV感染を予防する方法、

(7) 輸血時または血液製剤使用時に有効量のCCR (CCケモカイン受容体) 拮抗作用を有する化合物を投与することを特徴とするHIV感染を予防する方法、

(8) 輸血時または血液製剤使用時が輸血または血液製剤使用時の1時間前ないし同時である上記(7)記載の方法、

などに関する。

【0006】

【発明の実施の形態】

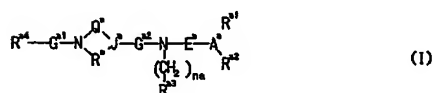
本発明において用いられるCCR拮抗作用を有する化合物は、特にCCR5および/またはCCR2拮抗作用、なかでもCCR5拮抗作用を有する化合物が好ましい。すなわち、CCR5およびCCR2のうちの一つの受容体の拮抗作用を有する化合物、またはこれらの二つの受容体の拮抗作用を併せ持つ化合物が好ましい。

CCR2拮抗作用を有する化合物としては、例えば、WO99-32468、WO99-32100、WO00-68203に記載のアニリド系化合物が、CCR5拮抗作用を有する化合物としては、例えば、上記アニリド系化合物の他、例えば、ピペリジン誘導体(WO00-66551、WO01-25199、WO01-25200、特願2000-328851)、4級アンモニウム部を有するアニリド誘導体(Poc. Natl. Acad. Sci. USA, 1999, 96, 5698-5703, J. Med. Chem. 2000, 43, 2049-2063に記載の化合物)等が挙げられる。

より具体的にはつぎの化合物群が挙げられる。

(1) CCR5拮抗作用を有する式：

【化1】



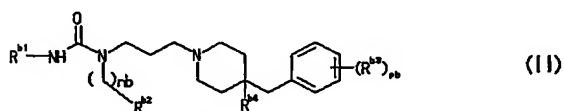
(式中、 $R^{a1}$ は水素原子、置換基を有してもよい炭化水素基、置換基を有してもよい非芳香族複素環基を、 $R^{a2}$ は置換基を有してもよい炭化水素基、置換基を有してもよい非芳香族複素環基を示すか、または $R^{a1}$ と $R^{a2}$ が結合して $A^a$ と共に置換基を有してもよい複素環基を形成してもよく、 $A^a$ はNまたは $N^+-R^{a5} \cdot Y^{a-}$ ( $R^{a5}$ は炭化水素基を、 $Y^{a-}$ はカウンターアニオンを示す)を、 $R^{a3}$ は置換基を有してもよい環状炭化水素基または置換基を有してもよい複素環基を、 $n$ は0または1を、 $R^{a4}$ は水素原子、置換基を有してもよい炭化水素基、置換基を有してもよい複素環基、置換基を有してもよいアルコキシ基、置換基を有してもよいアリール

オキシ基、置換基を有していてもよいアミノ基 $E^a$ はオキシ基以外の置換基を有していてもよい2価の鎖状炭化水素基を、 $G^{a1}$ は結合手、COまたは $SO_2$ を、 $G^{a2}$ はCO、 $SO_2$ 、 $NHCO$ 、 $CONH$ またはOCOを、 $J^a$ はメチンまたは窒素原子を、 $Q^a$ および $R^a$ はそれぞれ結合手または置換基を有していてもよい2価の $C_{1-3}$ 鎖状炭化水素をそれぞれ示す。ただし、 $G^{a2}$ がOCOのとき $J^a$ はメチンであり、 $Q^a$ および $R^a$ の双方が結合手ではなく、また $G^{a1}$ が結合手のとき $Q^a$ および $R^a$ はいずれもオキシ基で置換されない。)で表される化合物またはその塩、

【0007】

(2) 式:

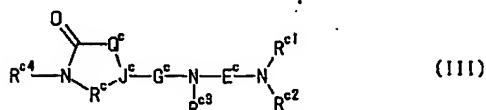
【化2】



(式中、 $R^{b1}$ は置換基を有していてもよい炭化水素基を、 $R^{b2}$ は置換基を有していてもよい環状炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を、 $R^{b3}$ はハロゲン原子、置換基を有していてもよいカルバモイル基、置換基を有していてもよいスルファモイル基、スルホン酸由来のアシル基、置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルキル基、置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基、置換基を有していてもよいアミノ基、ニトロ基またはシアノ基を、 $R^{b4}$ は水素原子または水酸基を、 $n_b$ は0または1を、 $p_b$ は0または1ないし4の整数を示す。)で表される化合物またはその塩、

(3) 式:

【化3】

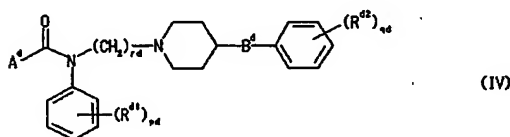


(式中、 $R^{c1}$ は炭化水素基を、 $R^{c2}$ は炭素数2以上の炭化水素基を示し、また $R^{c1}$ と $R^{c2}$ が結合して隣接する窒素原子と共に置換基を有していてもよい環を形成してもよく、 $R^{c3}$ は置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を、 $R^{c4}$ は水素原子、置換基を有していてもよい

い炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を、 $E^C$  はオキソ基以外の置換基を有していてもよい2価の鎖状炭化水素基を、 $G^C$  はCOまたは $SO_2$ を、 $J^C$  は窒素原子または置換基を有していてもよいメチン基を、 $Q^C$  および $R^C$  はそれぞれ結合手または置換基を有していてもよい2価の $C_{1-3}$  鎖状炭化水素基を示す。) で表される化合物またはその塩、

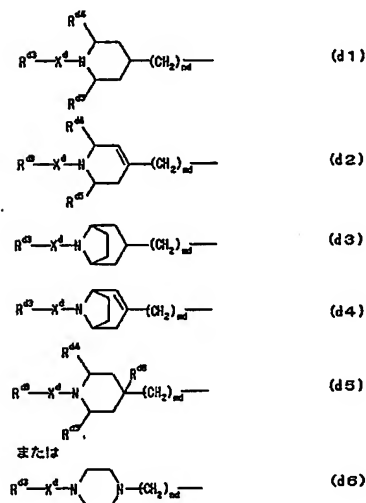
(4) 式:

【化4】



[式中、 $A^d$  は

【化5】



{式中、 $R^{d3}$  は (1) 置換基を有していてもよい炭化水素基、(2) 置換基を有していてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ基または (3) 置換基を有していてもよいアミノ基を、 $X^d$  は結合手、 $-SO_2-$  または $-CO-$  を、 $nd$  は1ないし3の整数を、 $md$  は0または1ないし3の整数を、 $R^{d4}$  および $R^{d5}$  はそれぞれ同一または異なって水素原子または $C_{1-6}$  アルキル基を、 $R^{d6}$  はヒドロキシ基、 $C_{1-6}$  アルキル基または $C_{2-6}$  アルケニル基をそれぞれ示す} で表される基を、 $rd$  は2ないし4の整数を、 $B^d$  は結合手、 $-CH_2-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-SO-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^{da}-SO_2-$  または $-NR^{da}-C$



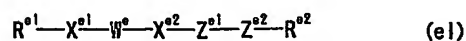
O- (ただし、 $R^{da}$  は水素原子、 $C_{1-6}$  アルキル基、 $C_{2-6}$  アルケニル基または $C_{3-8}$  シクロアルキル基を示す) を、 $p_d$  および  $q_d$  はそれぞれ 0 または 1 ないし 4 の整数を、 $R^{d1}$  はハロゲン原子、 $C_{1-6}$  アルキル基、 $C_{2-4}$  アルケニル基、 $C_{1-4}$  アルカノイル基、 $C_{1-4}$  アルコキシ基、シアノ基、トリフルオロメチル基、ニトロ基、ヒドロキシ基、アミノ基、アミジノ基を、 $R^{d2}$  は 1) ハロゲン、2) 置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよい $C_{1-6}$  アルキル、3) 置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ、4) ニトロ、5) シアノ、6) ヒドロキシ、7)  $C_{1-4}$  アルカノイルアミノ、8)  $SO_2NR^{db}R^{dc}$ 、9)  $SO_2R^{dd}$ 、10)  $CONR^{db}R^{dc}$ 、11)  $NR^{db}R^{dc}$  または 12)  $NR^{da}-SO_2R^{dd}$  {ただし、 $R^{da}$  は前記と同意義であり、 $R^{db}$  および  $R^{dc}$  は同一または異なって (1) 水素原子、

(2) 置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよい $C_{1-6}$  アルキル基または (3) 置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよい $C_{3-8}$  シクロアルキル基を示すか、または  $R^{db}$  と  $R^{dc}$  が結合して窒素原子と共に環状アミノ基を形成していてもよく、 $R^{dd}$  は $C_{1-6}$  アルキル基または $C_{3-8}$  シクロアルキル基を示す} をそれぞれ示し、 $p_d$  が複数のとき個々の  $R^{d1}$  は互いに同一または異なってもよく、 $q_d$  が複数のとき個々の  $R^{d2}$  は互いに同一または異なってもよい] で表される化合物またはその塩、

【0008】

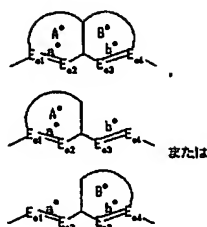
(5) 式:

【化6】



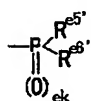
[式中、 $R^{e1}$  は置換されていてもよい 5~6 員環基を示し、 $X^{e1}$  は結合手または直鎖部分を構成する原子数が 1 ないし 4 個である 2 価の基を示し、 $W^e$  は式:

## 【化 7】



(式中、環 A<sup>e</sup> および環 B<sup>e</sup> はそれぞれ置換されていてもよい 5～7 員環を示し、E<sub>e1</sub> および E<sub>e4</sub> はそれぞれ置換されていてもよい炭素原子または置換されていてもよい窒素原子を示し、E<sub>e2</sub> および E<sub>e3</sub> は置換されていてもよい炭素原子、置換されていてもよい窒素原子、酸化されていてもよい硫黄原子または酸素原子を示し、a<sup>e</sup> および b<sup>e</sup> はそれぞれ単結合または二重結合であることを示す) で表される 2 価の基を示し、X<sup>e2</sup> は直鎖部分を構成する原子数が 1 ないし 4 個である 2 価の基を示し、Z<sup>e1</sup> は結合手または 2 価の環状基を示し、Z<sup>e2</sup> は結合手または直鎖部分を構成する炭素原子数が 1 ないし 4 個である 2 価の基を示し、R<sup>e2</sup> は (1) 置換されていてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよいアミノ基、(2) 置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよい含窒素複素環基、(3) 硫黄原子を介して結合する基、(4) 式：

## 【化 8】



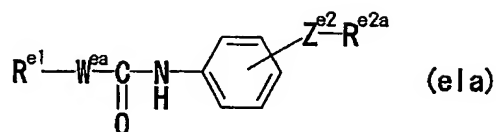
(式中、e<sub>k</sub> は 0 または 1 を示し、e<sub>k</sub> が 0 の時、リン原子はホスホニウム塩を形成していてもよく、R<sup>e5'</sup> および R<sup>e6'</sup> はそれぞれ置換されていてもよい炭化水素基、置換されていてもよい水酸基または置換されていてもよいアミノ基を示し、R<sup>e5'</sup> および R<sup>e6'</sup> は互いに結合して隣接するリン原子とともに環状基を形成していてもよい) で表される基、(5) 置換されていてもよいアミジノ基または (6) 置換されていてもよいグアニジノ基を示す] で表される化合物またはその塩が挙げられる。

上記式 (e 1) で表される化合物またはその塩としては、より具体的にはつぎ

の化合物群が挙げられる。

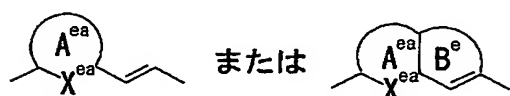
1) 式:

【化 9】



〔式中、 $R^{e1}$  は置換されていてもよい 5～6 員環を示し、 $W^{e2a}$  は式:

【化 10】



(式中、環  $A^{ea}$  は置換されていてもよい 5～6 員芳香環を示し、 $X^{ea}$  は置換されていてもよい炭素原子、置換されていてもよい窒素原子、硫黄原子または酸素原子を示し、環  $B^e$  は置換されていてもよい 5～7 員環を示す) で表される二価の基を示し、 $Z^{e2}$  は結合手または直鎖部分を構成する炭素原子数が 1 ないし 4 である二価の基を示し、 $R^{e2a}$  は (1) 置換されていてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化されていてもよいアミノ基、(2) 置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化されていてもよい含窒素複素環基、(3) 硫黄原子を介して結合する基または (4) 式:

【化 11】

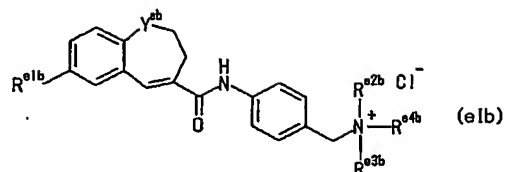


(式中、 $ek$  は 0 または 1 を示し、 $ek$  が 0 の時、リン原子はホスホニウム塩を形成していてもよく、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  はそれぞれ置換されていてもよい炭化水素基または置換されていてもよいアミノ基を示し、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  は互いに結合して隣接するリン原子とともに環状基を形成していてもよい) で表される基を示す] で表される化合物またはその塩、

【0009】

2) 式:

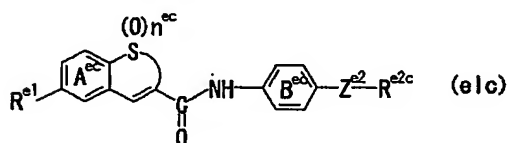
【化12】



[式中、 $R^{e1b}$  は置換されていてもよいフェニル基または置換されていてもよいチエニル基を示し、 $Y^{eb}$  は  $-CH_2-$ 、 $-O-$  または  $-S-$  を示し、 $R^{e2b}$ 、 $R^{e3b}$  および  $R^{e4b}$  はそれぞれ置換されていてもよい脂肪族炭化水素基または置換されていてもよい脂環式複素環基を示す] で表される化合物またはその塩、

3) 式:

【化13】



[式中、 $R^{e1}$  は置換されていてもよい5～6員環を示し、環  $A^{ec}$  は置換されていてもよい6～7員環を示し、環  $B^{ec}$  は置換されていてもよいベンゼン環を示し、 $n^{ec}$  は1または2を示し、 $Z^{e2}$  は結合手または直鎖部分を構成する炭素原子数が1ないし4である二価の基を示し、 $R^{e2c}$  は(1)置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよいアミノ基、(2)置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよい含窒素複素環基、(3)硫黄原子を介して結合する基または(4)式:

【化14】

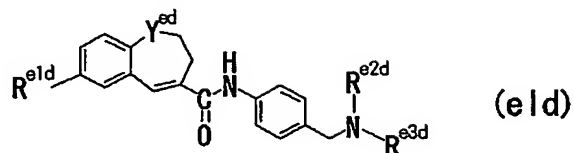


(式中、 $ek$  は0または1を示し、 $ek$  が0の時、リン原子はホスホニウム塩を形成していてもよく、 $R^{e5'}$  および  $R^{e6'}$  はそれぞれ置換されていてもよい炭化水素基、置換されていてもよい水酸基または置換されていてもよいアミノ基を示し、 $R^{e5'}$  および  $R^{e6'}$  は互いに結合して隣接するリン原子とともに環状基

を形成していてもよい) で表される基を示す] で表される化合物またはその塩、

4) 式:

【化15】



[式中、 $R^{e1d}$  は式  $R^{ed} - Z^{e1d} - X^{ed} - Z^{e2d} -$  (式中、 $R^{ed}$  は水素原子または置換されていてもよい炭化水素基を示し、 $X^{ed}$  は置換されていてもよいアルキレン鎖を示し、 $Z^{e1d}$  および  $Z^{e2d}$  はそれぞれヘテロ原子を示す。) で表される置換基を有し、さらに置換基を有していてもよい5～6員芳香環を示し、 $R^{ed}$  で示される基は5～6員芳香環と結合して環を形成していてもよく、 $Y^{ed}$  は置換されていてもよいイミノ基を示し、 $R^{e2d}$  および  $R^{e3d}$  はそれぞれ置換されていてもよい脂肪族炭化水素基または置換されていてもよい脂環式複素環基を示す] で表される化合物またはその塩。

【0010】

式(I)中、 $R^{a1}$  で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「炭化水素基」としては、例えば脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基等が挙げられる。好ましくは脂肪族鎖式炭化水素基または脂環式炭化水素基である。

該脂肪族鎖式炭化水素基としては、例えばアルキル基、アルケニル基、アルキニル基等の直鎖状又は分枝鎖状の脂肪族炭化水素基が挙げられる。好ましくはアルキル基である。該アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、1-メチルプロピル、*n*-ヘキシル、イソヘキシル、1,1-ジメチルブチル、2,2-ジメチルブチル、3,3-ジメチルブチル、3,3-ジメチルプロピル、2-エチルブチル、*n*-ヘプチル、1-メチルヘプチル、1-エチルヘキシル、*n*-オクチル、1-メチルヘプチル、ノニル等の  $C_{1-10}$  アルキル基 (好ましくは  $C_{1-6}$  アルキル等) 等が挙げられる。該アルケニル基としては、例えばビニル、アリル、イソプロペニル、2-

メチルアリル、1-プロペニル、2-メチル-1-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-エチル-1-ブテニル、2-メチル-2-ブテニル、3-メチル-2-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、4-メチル-3-ペンテニル、1-ヘキセニル、2-ヘキセニル、3-ヘキセニル、4-ヘキセニル、5-ヘキセニル等の $C_{2-6}$ アルケニル基等が挙げられる。該アルキニル基としては、例えばエチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ブチニル、3-ブチニル、1-ペンチニル、2-ペンチニル、3-ペンチニル、4-ペンチニル、1-ヘキシニル、2-ヘキシニル、3-ヘキシニル、4-ヘキシニル、5-ヘキシニル等の $C_{2-6}$ アルキニル基が挙げられる。

該脂環式炭化水素基としては、例えばシクロアルキル基、シクロアルケニル基、シクロアルカンジエニル基等の飽和又は不飽和の脂環式炭化水素基が挙げられる。好ましくはシクロアルキル基である。該シクロアルキル基としては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル等の $C_{3-9}$ シクロアルキル（好ましくは $C_{3-8}$ シクロアルキル等）等、また1-インダニル、2-インダニルなどの縮合環が挙げられる。該シクロアルケニル基としては、例えば2-シクロペンテン-1-イル、3-シクロペンテン-1-イル、2-シクロヘキセン-1-イル、3-シクロヘキセン-1-イル、1-シクロブテン-1-イル、1-シクロペンテン-1-イル等の $C_{3-6}$ シクロアルケニル基等が挙げられる。該シクロアルカンジエニル基としては、例えば2,4-シクロペンタンジエン-1-イル、2,4-シクロヘキサンジエン-1-イル、2,5-シクロヘキサンジエン-1-イル等の $C_{4-6}$ シクロアルカンジエニル基等が挙げられる。

#### 【0011】

該アリール基としては、単環式又は縮合多環式芳香族炭化水素基が挙げられ、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル、4-インダニル、5-インダニル等の $C_{6-14}$ アリール基等が好ましく、中でもフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が特に好ましい。

$R^{a1}$ で示される「置換基を有していてもよい非芳香族複素環基」における「

「非芳香族複素環基」としては、例えばオキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、ピペラジニル等の3～8員（好ましくは5～6員）の飽和あるいは不飽和（好ましくは飽和）の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）などが挙げられる。

$R^{a1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」および「置換基を有していてもよい非芳香族複素環基」における「置換基」としては、例えば置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアルケニル基、置換されていてもよいアルキニル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、置換されていてもよい複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよいイミドイル基、置換されていてもよいアミジノ基、置換されていてもよい水酸基、置換されていてもよいチオール基、エステル化されていてもよいカルボキシ基、置換されていてもよいカルバモイル基、置換されていてもよいチオカルバモイル基、置換されていてもよいスルファモイル基、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等、好ましくは塩素、臭素等）、シアノ基、ニトロ基、スルホン酸由来のアシル基、カルボン酸由来のアシル基、置換されていてもよいアルキルスルフィニル基、置換されていてもよいアリールスルフィニル基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に1ないし5個（好ましくは1ないし3個）置換していてもよい。

置換基としての「置換されていてもよいアリール基」におけるアリール基としては、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル等の $C_{6-14}$ アリール基等が挙げられる。ここで、アリール基の置換基としては、ハロゲンで置換されていてもよい低級アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基、例えばフルオロメトキシ、ジフルオロメトキシ、トリフルオロメトキシ、1, 1-ジフルオロエトキシ、2, 2-ジフルオロエトキシ、3, 3-ジフルオロプロポキシ、2, 2, 3, 3, 3-ペンタフルオロプロポキシなどのハロゲン置換 $C_{1-4}$ アルコキシ基等）、置換基を有していてもよいアリールオキシ（例えば、フェノキシ、4-フルオロフ

エノキシ、2-カルバモイルフェノキシ等)、ハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)、置換基を有していてもよい低級アルキル基(例えばメチル、エチル、プロピル等無置換の $C_{1-6}$ アルキル基、例えばフルオロメチル、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル、1, 1-ジフルオロエチル、2, 2-ジフルオロエチル、3, 3-ジフルオロプロピル、2, 2, 3, 3, 3-ペンタフルオロプロピルなどのハロゲン置換 $C_{1-4}$ アルキル基、等)、 $C_{3-8}$ シクロアルキル(例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなど)、アミノ基、モノ置換アミノ(例えばカルバモイルアミノ、メチルスルホニルアミノ、メチルアミノ、エチルアミノ、プロピルアミノなど)、ジ置換アミノ(例えばジメチルアミノ、ジエチルアミノ、N-メチル-N-メチルスルホニルアミノ、ジ(メチルスルホニル)アミノなど)、 $C_{1-6}$ アルキルで置換されていてもよいカルバモイル基(例えば、ブチルカルバモイルなど)、ホルミル、 $C_{2-6}$ アルカノイル基(例えば、アセチル、プロピオニル、ブチリルなどの $C_{2-6}$ アルカノイルなど)、 $C_{6-14}$ アリール基(例えば、フェニル、ナフチルなど)、 $C_{6-14}$ アリールカルボニル(例えば、ベンゾイル、ナフトイルなど)、 $C_{7-13}$ アラルキルカルボニル(例えば、ベンジルカルボニル、ナフチルメチルカルボニルなど)、水酸基、アルカノイルオキシ(例えばアセチルオキシ、プロピオニルオキシ、ブチリルオキシなどの $C_{2-5}$ アルカノイルオキシ)、 $C_{7-13}$ アラルキルカルボニルオキシ(例、ベンジルカルボニルオキシなど)、ニトロ基、置換されていてもよいスルファモイル基(無置換のスルファモイル基の他例えばN-メチルスルファモイル等)、置換されていてもよいアリールチオ基(例えばフェニルチオ、4-メチルフェニルチオ等)、 $-N=N-$ フェニル、シアノ基、アミジノ基、エステル化されていてもよいカルボキシル基(遊離のカルボキシル基の他、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、t-ブトキシカルボニル等の $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル等)、 $C_{1-6}$ アルキルチオ、 $C_{1-6}$ アルキルスルフィニル、 $C_{1-6}$ アルキルスルホニル、 $C_{6-14}$ アリールチオ、 $C_{6-14}$ アリールスルフィニル、 $C_{6-14}$ アリールスルホニル、置換基を有していてもよい複素環基(例えばピリジル、チエニル、テトラゾリル、モルホリニル、オキサゾリルなどの他、下記R



a<sup>3</sup>で示される置換基を有していてもよい複素環基として述べたもの)等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に1又は2個置換していてもよい。

### 【0012】

置換基としての「置換されていてもよいシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基としては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル等のC<sub>3</sub> - 7シクロアルキル基等が挙げられる。ここで、シクロアルキル基の置換基としては、前記した「置換されていてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換されていてもよいシクロアルケニル基」におけるシクロアルケニル基としては、例えばシクロプロペニル、シクロブテニル、シクロペンテニル、シクロヘキセニル等のC<sub>3</sub> - 6シクロアルケニル基等が挙げられる。ここで、置換されていてもよいシクロアルケニル基の置換基としては、前記した「置換されていてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換されていてもよいアルキル基」におけるアルキル基としては、例えばメチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、n-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、1-メチルプロピル、n-ヘキシル、イソヘキシル、1,1-ジメチルブチル、2,2-ジメチルブチル、3,3-ジメチルブチル、3,3-ジメチルプロピル等のC<sub>1</sub> - 6アルキル等が挙げられる。ここで、アルキル基の置換基としては、前記した「置換されていてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換されていてもよいアルケニル基」におけるアルケニル基としては、例えばビニル、アリル、イソプロペニル、2-メチルアリル、1-プロペニル、2-メチル-1-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-エチル-1-ブテニル、2-メチル-2-ブテニル、3-メチル-2-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、4-メチル-3-ペンテニル、1-ヘキセニル、2-ヘキセニル、3-ヘ

キセニル、4-ヘキセニル、5-ヘキセニル等の $C_{2-6}$ アルケニル基等が挙げられる。ここで、アルケニル基の置換基としては、前記した「置換されていてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換されていてもよいアルキニル基」におけるアルキニル基としては、例えばエチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ブチニル、3-ブチニル、1-ペンチニル、2-ペンチニル、3-ペンチニル、4-ペンチニル、1-ヘキシニル、2-ヘキシニル、3-ヘキシニル、4-ヘキシニル、5-ヘキシニル等の $C_{2-6}$ アルキニル基が挙げられる。ここで、アルキニル基の置換基としては、前記した「置換されていてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換されていてもよい複素環基」における複素環基としては、環系を構成する原子（環原子）として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種（好ましくは1ないし2種）を少なくとも1個（好ましくは1ないし4個、さらに好ましくは1ないし2個）含む芳香族複素環基、飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）等が挙げられる。

#### 【0013】

「芳香族複素環基」としては、芳香族単環式複素環基（例えばフリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリアゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、トリアジニル等の5ないし6員の芳香族単環式複素環基）及び芳香族縮合複素環基〔例えばベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニ

ル、ナフチリジニル、プリニル、ブテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-b〕ピリダジニル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリミジニル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-a〕ピリジル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-b〕ピリダジニル等の8~12員の芳香族縮合複素環基（好ましくは、前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基がベンゼン環と縮合した複素環基または前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基の同一または異なった複素環2個が縮合した複素環基）などが挙げられる。

「非芳香族複素環基」としては、例えばオキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、ピペラジニル等の3~8員（好ましくは5~6員）の飽和あるいは不飽和（好ましくは飽和）の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）などが挙げられる。

置換基としての「置換されていてもよい複素環基」が有していてもよい置換基としては、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル、例えばベンゾイル等のアリアルカルボニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の $C_{1-6}$ アルキルスルホニル、例えばアミノスルホニル、メチルアミノスルホニル、ジメチルアミノスルホニル等の置換スルホニル等）、ハロゲン化低級アルキル（例えばトリフルオロメチル、1,1-ジフルオロエチル等）等が挙げられる。

#### 【0014】

置換基としての「置換されていてもよいアミノ基」、「置換されていてもよいイミドイル基」、「置換されていてもよいアミジノ基」、「置換されていてもよい水酸基」及び「置換されていてもよいチオール基」における置換基としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチ

ル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等)、アリール基(例えば、フェニル、4-メチルフェニル等)、アシル基( $C_{1-6}$  アルカノイル(例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等)の  $C_{1-6}$  アルカノイル、例えばベンゾイル等のアリールカルボニル、アルキルスルホニル(例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の  $C_{1-6}$  アルキルスルホニル、例えばパラトルエンスルホニル等)の  $C_{6-14}$  アリールスルホニル、例えばアミノスルホニル、メチルアミノスルホニル、ジメチルアミノスルホニル等の置換スルホニル等)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシカルボニル(例えばトリフルオロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリフルオロエトキシカルボニル、トリクロロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリクロロエトキシカルボニル等)等が挙げられるが、置換基としての「置換されていてもよいアミノ基」における「アミノ基」は、置換されていてもよいイミドイル基(例えば、 $C_{1-6}$  アルキルイミドイル、ホルミルイミドイル、アミジノ等)などで置換されていてもよく、また、2個の置換基が窒素原子と一緒になって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノ基としては、例えば1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、ピペリジノ1-ピペリジニル、モルホリノ4-モルホリニル、1-ピペラジニル及び4位に低級アルキル基(例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等)、アラルキル基(例えばベンジル、フェネチル等の  $C_{7-10}$  アラルキル基等)、アリール基(例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の  $C_{6-10}$  アリール基等)等を有していてもよい1-ピペラジニル等の3~8員(好ましくは5~6員)の環状アミノなどが挙げられる。

#### 【0015】

「置換されていてもよいカルバモイル基」としては、無置換のカルバモイルの他、N-モノ置換カルバモイル基及びN,N-ジ置換カルバモイル基が挙げられる。

「N-モノ置換カルバモイル基」は窒素原子上に1個の置換基を有するカルバモイル基を意味し、該置換基としては、例えば低級アルキル基(例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル

、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等)、シクロアルキル基 (例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等の  $C_{3-6}$  シクロアルキル基等)、アリール基 (例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の  $C_{6-10}$  アリール基等)、アラルキル基 (例えばベンジル、フェネチル等の  $C_{7-10}$  アラルキル基、好ましくはフェニル- $C_{1-4}$  アルキル基等)、複素環基 (例えば前記した  $R^{a1}$  で示される「置換されていてもよい炭化水素基」における置換基としての「複素環基」と同様のもの等) 等が挙げられる。該低級アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基、複素環基は置換基を有していてもよく、その置換基としては、例えば水酸基、置換されていてもよいアミノ基 [該アミノ基は、例えば低級アルキル基 (例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等)、アシル基 (例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の  $C_{1-6}$  アルカノイル、例えばベンゾイル等のアリールカルボニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の  $C_{1-6}$  アルキルスルホニル) 等の1又は2個を置換基として有していてもよい。]、ハロゲン原子 (例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)、ニトロ基、シアノ基、1ないし5個のハロゲン原子 (例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等) で置換されていてもよい低級アルキル基、1ないし5個のハロゲン原子 (例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等) で置換されていてもよい低級アルコキシ基等が挙げられる。該低級アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等が挙げられ、特にメチル、エチル等が好ましい。該低級アルコキシ基としては、例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ等の  $C_{1-6}$  アルコキシ基等が挙げられ、特にメトキシ、エトキシ等が好ましい。また、これらの置換基は、同一又は異なって1又は2ないし3個 (好ましくは1又は2個) 置換しているのが好ましい。

「N,N-ジ置換カルバモイル基」は、窒素原子上に2個の置換基を有するカルバモイル基を意味し、該置換基の一方の例としては上記した「N-モノ置換カ

ルバモイル基」における置換基と同様のものが挙げられ、他方の例としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、 $C_{3-6}$ シクロアルキル基（例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等）、 $C_{7-10}$ アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等、好ましくはフェニル- $C_{1-4}$ アルキル基等）等が挙げられる。また、2個の置換基が窒素原子と一緒になって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノカルバモイル基としては、例えば1-アゼチジニルカルボニル、1-ピロリジニルカルボニル、1-ピペリジニルカルボニル、4-モルホリニルカルボニル、1-ピペラジニルカルボニル及び4位に低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基等）、アリール基（例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等）等を有していてもよい1-ピペラジニルカルボニル等の3～8員（好ましくは5～6員）の環状アミノ-カルボニルなどが挙げられる。

#### 【0016】

「置換されていてもよいチオカルバモイル基」の置換基としては、前記した「置換されていてもよいカルバモイル基」の置換基と同様のものが挙げられる。

「置換基を有していてもよいスルファモイル基」としては、無置換のスルファモイルの他、N-モノ置換スルファモイル基及びN,N-ジ置換スルファモイル基が挙げられる。

「N-モノ置換スルファモイル基」は窒素原子上に1個の置換基を有するスルファモイル基を意味し、該置換基としては、N-モノ置換カルバモイル基の置換基と同様のものが挙げられる。

「N,N-ジ置換スルファモイル基」は、窒素原子上に2個の置換基を有するスルファモイル基を意味し、該置換基としては、N,N-ジ置換カルバモイル基の置換基と同様のものが挙げられる。

エステル化されていてもよいカルボキシル基としては遊離のカルボキシル基の

他、例えば低級アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アラルキルオキシカルボニル基等が挙げられる。

「低級アルコキシカルボニル基」としては、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、イソプロポキシカルボニル、ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニル、sec-ブトキシカルボニル、tert-ブトキシカルボニル、ペンチルオキシカルボニル、イソペンチルオキシカルボニル、ネオペンチルオキシカルボニル等の $C_{1-6}$ アルコキシカルボニル基等が挙げられ、中でもメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル等の $C_{1-3}$ アルコキシカルボニル基等が好ましい。

「アリールオキシカルボニル基」としては、例えばフェノキシカルボニル、1-ナフトキシカルボニル、2-ナフトキシカルボニル等の $C_{7-12}$ アリールオキシカルボニル基等が好ましい。

「アラルキルオキシカルボニル基」としては、例えばベンジルオキシカルボニル、フェネチルオキシカルボニル等の $C_{7-10}$ アラルキルオキシカルボニル基等（好ましくは、 $C_{6-10}$ アリール- $C_{1-4}$ アルコキシカルボニルなど）が好ましい。

該「アリールオキシカルボニル基」、「アラルキルオキシカルボニル基」は置換基を有していてもよく、その置換基としては、前記したN-モノ置換カルバモイル基の置換基の例としてのアリール基、アラルキル基の置換基として挙げたものと同様のものが同様な数用いられる。

#### 【0017】

置換基としての「スルホン酸由来のアシル基」としては、炭化水素基とスルホニルとが結合したものなどが挙げられるが、好ましくは $C_{1-10}$ アルキルスルホニル、 $C_{2-6}$ アルケニルスルホニル、 $C_{2-6}$ アルキニルスルホニル、 $C_{3-9}$ シクロアルキルスルホニル、 $C_{3-9}$ シクロアルケニルスルホニル、 $C_{6-14}$ アリールスルホニル、 $C_{7-10}$ アラルキルスルホニル等のアシルが挙げられる。具体的にはここでの $C_{1-10}$ アルキルとしては、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、t-ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル等が挙げられる。 $C_{2-6}$ アルケニルとしては、例えばビニル、

アリル、1-プロペニル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-ヘキセニル等が挙げられる。 $C_{2-6}$ アルキニルとしては、例えばエチニル、2-プロピニル、2-ブチニル、5-ヘキシニル等が挙げられる。 $C_{3-9}$ シクロアルキルとしては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチル等が挙げられる。 $C_{3-9}$ シクロアルケニルとしては、例えば1-シクロペンテン-1-イル、2-シクロペンテン-1-イル、3-シクロペンテン-1-イル、3-シクロヘキセン-1-イル、3-シクロオクテン-1-イル等が挙げられる。 $C_{6-14}$ アリールとしてはフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が挙げられる。 $C_{7-10}$ アラルキルスルホニルとしては、例えばベンジル、フェネチル等が挙げられる。スルホニルと結合したこれらの炭化水素基は置換基を有していてもよく、その置換基としては、例えば水酸基、置換されていてもよいアミノ基〔該アミノ基は、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル、例えばベンゾイル等のアリールカルボニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の $C_{1-6}$ アルキルスルホニル）等の1又は2個を置換基として有していてもよい。〕、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、ニトロ基、シアノ基、1ないし5個のハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）で置換されていてもよい低級アルキル基、1ないし5個のハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）で置換されていてもよい低級アルコキシ基等が挙げられる。該低級アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等が挙げられ、特にメチル、エチル等が好ましい。該低級アルコキシ基としては、例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等が挙げられ、特にメトキシ、エトキシ等が好ましい。また、これらの置換基は、同一又は異なって1又は2ないし3個（好ましくは1又は2個）置換しているのが好ましい。



## 【0018】

置換基としての「カルボン酸由来のアシル基」としては、水素原子又は前記した「N-モノ置換カルバモイル基」が窒素原子上に1個有する置換基とカルボニルとが結合したものなどが挙げられるが、好ましくは、ホルミル、アセチル、トリフルオロアセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリル、ピバロイル等のC<sub>1</sub>-6アルカノイル、ベンゾイル等のアリールカルボニル等のアシルが挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいアルキルスルフィニル基」におけるアルキルとしては、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、t-ブチル、ペンチル、ヘキシル等のC<sub>1</sub>-6アルキル基等の低級アルキル基が挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいアリールスルフィニル基」におけるアリールとしては、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル等のC<sub>6</sub>-14アリール基等が挙げられる。

これらのアルキル、アリールの置換基としては、低級アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ等のC<sub>1</sub>-6アルコキシ基等）、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等のC<sub>1</sub>-6アルキル基等）、アミノ基、水酸基、シアノ基、アミジノ基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に1又は2個置換していてもよい。

R<sup>a2</sup>で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」および「置換基を有していてもよい非芳香族複素環基」としては、R<sup>a1</sup>で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」および「置換基を有していてもよい非芳香族複素環基」と同様のものが挙げられ、好ましくはR<sup>a1</sup>で述べたもののうち置換基を有していてもよいC<sub>2</sub>-6アルキルおよび置換基を有していてもよいC<sub>3</sub>-8シクロアルキルである。

R<sup>a1</sup>とR<sup>a2</sup>が結合して隣接する窒素原子と共に置換基を有していてもよい複素環基を形成する場合、このような環としては、1個の窒素原子の他にさらに窒素原子、酸素原子、イオウ原子を含む環であってもよく、その例としてはたと

例えば、1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、1-ホモピペリジニル、ヘプタメチレンイミノ、1-ピペラジニル、1-ホモピペラジニル、4-モルホリニル、4-チオモルホリニルなどの単環、2-イソインドリニル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-2-イソキノリル、1, 2, 4, 5-テトラヒドロ-3H-3-ベンゾアゼピン-3-イルなどの縮合環、インデン-1-スピロ-4'-ピペリジン-1'-イルなどのスピロ環などの環状アミノ基が挙げられる。該環状アミノ基は該環上の化学的に可能な位置に1~5個、好ましくは1~3個の置換基を有していてもよい。

## 【0019】

該置換基としては、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、オキソ基、ハロゲン原子、および一般式： $-Y^a R^{aa}$ （式中、 $R^{aa}$ は置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を、 $Y^a$ は結合手（単結合）、 $-CR^{ab}R^{ac}$ 、 $-COO-$ 、 $-CO-$ 、 $-CR^{ab}(OH)-$ 、 $-CO-NR^{ab}$ 、 $-CS-NR^{ab}$ 、 $-CO-S-$ 、 $-CS-S-$ 、 $-CO-NR^{ab}-CO-NR^{ac}$ 、 $-C(=NH)-NR^{ab}$ 、 $-NR^{ab}$ 、 $-NR^{ab}-CO-$ 、 $-NR^{ab}-CS-$ 、 $-NR^{ab}-CO-NR^{ac}$ 、 $-NR^{ab}-CS-NR^{ac}$ 、 $-NR^{ab}-CO-O-$ 、 $-NR^{ab}-CS-O-$ 、 $-NR^{ab}-CO-S-$ 、 $-NR^{ab}-CS-S-$ 、 $-NR^{ab}-C(=NH)-NR^{ac}$ 、 $-NR^{ab}-SO_2-$ 、 $-NR^{ab}-NR^{ac}$ 、 $-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-O-CS-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-O-CO-NR^{ab}$ 、 $-O-C(=NH)-NR^{ab}$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-CR^{ab}R^{ac}-S-$ 、 $CR^{ab}R^{ac}-SO_2-$ 、 $-SO_2-NR^{ab}$ 、 $-S-CO-$ 、 $-S-CS-$ 、 $-S-CO-NR^{ab}$ 、 $-S-CS-NR^{ab}$ 、 $-S-C(=NH)-NR^{ab}$ 、などを示し、 $R^{ab}$ 、 $R^{ac}$ は水素原子、置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアルケニル基、置換されていてもよいアルキニル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、置換されていてもよい複素環基、スルホン酸由来のアシル基、カルボン酸由来のアシル基等を示す）で表される基などが挙げられる。前記 $R^{aa}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」の「炭化水素基」としては、例えば脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基等が挙げられる。これらの脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基と

しては前記  $R^{a1}$  で示される脂肪鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基として述べたものがそれぞれ挙げられる。また該炭化水素基の置換基としては前記  $R^{a1}$  で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における置換基として述べたものが挙げられる。

前記  $R^{aa}$  で示される「置換基を有していてもよい複素環基」における「複素環基」としては、後述の  $R^{a3}$  で示される「置換基を有していてもよい複素環基」における「複素環基」と同様なものが挙げられる。該「置換基を有していてもよい複素環基」における「置換基」としては、前記  $R^{a1}$  で示される「置換基を有していてもよい非芳香族複素環基」における「置換基」として述べたものが挙げられる。

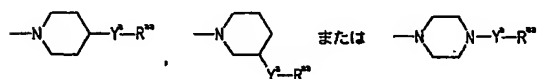
前記  $R^{ab}$  および  $R^{ac}$  で示される置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアルケニル基、置換されていてもよいアルキニル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、置換されていてもよい複素環基、スルホン酸由来のアシル基、カルボン酸由来のアシル基としては前記  $R^{a1}$  で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における置換基として述べたものが挙げられる。

$R^{a1}$  および  $R^{a2}$  としては、両者が結合して窒素原子と共に置換基を有していてもよい複素環を形成しているのが好ましい。

【0020】

さらに好ましくは、 $NR^{a1}R^{a2}$  が式：

【化16】



(式中、 $Y^a$  および  $R^{aa}$  は前記と同意義である) で示される基のときである。ここで、 $Y^a$  と  $R^{aa}$  は前記と同意義を示すが、 $R^{aa}$  は特に置換基を有していてもよいアリール基または置換基を有していてもよい複素環基が好ましい。

$R^{a3}$  で示される「置換基を有していてもよい環状炭化水素基」における「環状炭化水素基」としては、脂環式炭化水素基、アリール基などが挙げられる。

該脂環式炭化水素基としては、例えばシクロアルキル基、シクロアルケニル基

、シクロアルカンジエニル基等の飽和又は不飽和の脂環式炭化水素基が挙げられる。好ましくはシクロアルキル基である。該シクロアルキル基としては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル等の $C_3 - 9$ シクロアルキル（好ましくは $C_3 - 8$ シクロアルキル等）等、また1-インダニル、2-インダニルなどの縮合環が挙げられる。該シクロアルケニル基としては、例えば2-シクロペンテン-1-イル、3-シクロペンテン-1-イル、2-シクロヘキセン-1-イル、3-シクロヘキセン-1-イル、1-シクロブテン-1-イル、1-シクロペンテン-1-イル等の $C_3 - 6$ シクロアルケニル基等が挙げられる。該シクロアルカンジエニル基としては、例えば2,4-シクロペンタレンジエン-1-イル、2,4-シクロヘキサレンジエン-1-イル、2,5-シクロヘキサレンジエン-1-イル等の $C_4 - 6$ シクロアルカンジエニル基等が挙げられる。

該アリール基としては、単環式又は縮合多環式芳香族炭化水素基が挙げられ、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル、4-インダニル、5-インダニル等の $C_6 - 14$ アリール基等が好ましく、中でもフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が特に好ましい。

$R^{a3}$ で示される置換基を有していてもよい環状炭化水素基における置換基としては、前記 $R^{a1}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における置換基として述べたものが挙げられる。該環状炭化水素基が脂環式炭化水素基であるときは、たとえばフェニル基、トリル基などの $C_1 - 6$ アルキルで置換されていてもよいフェニル基、ナフチル基などが挙げられる。該環状炭化水素基がアリール基であるときは、たとえばハロゲン原子（例えば塩素原子、フッ素原子等）、 $C_1 - 6$ アルキル基（メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等）、 $C_1 - 6$ アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ等）、 $C_3 - 6$ シクロアルキル基（例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等）、ハロゲン化 $C_1 - 6$ アルキル基（トリフルオロメチル等）、ハロゲン化 $C_1 - 6$ アルコキシ基（トリフルオロメチルオキシ等）、 $C_1 - 6$ アルキルチオ基（メチルチオ、エチルチオ等）、 $C_1 - 6$ アルキルスルホ

ニル基（メチルスルホニル、エチルスルホニル等）、シアノ基、ニトロ基などが挙げられる。

# 【0021】

$R^{a3}$ で示される「置換基を有していてもよい複素環基」における複素環基としては、例えば、環系を構成する原子（環原子）として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種（好ましくは1ないし2種）を少なくとも1個（好ましくは1ないし4個、さらに好ましくは1ないし2個）含む芳香族複素環基、飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）等が挙げられる。

該芳香族複素環基としては、芳香族単環式複素環基（例えばフリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリアゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、トリアジニル等の5ないし6員の芳香族単環式複素環基）及び芳香族縮合複素環基〔例えばベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾピラニル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、ベンゾジオキソリル、ベンゾイミダゾリル、2,1,1-ベンズオキサジアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プーリニル、プテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔1,5-a〕ピリジル、ピラゾロ〔3,4-b〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-b〕ピリダジニル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリミジ

ニル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-a〕ピリジル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-b〕ピリダジニル等の8~12員の芳香族縮合複素環基（好ましくは、前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基がベンゼン環と縮合した複素環または前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基の同一または異なった複素環2個が縮合した複素環）などが挙げられる。

該非芳香族複素環基としては、例えばオキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、ピペラジニル等の3~8員（好ましくは5~6員）の飽和あるいは不飽和（好ましくは飽和）の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）などが挙げられる。

$R^{a3}$ で示される「置換基を有していてもよい複素環基」における置換基としては、前記 $R^{a1}$ で示される「置換基を有していてもよい非芳香族複素環基」における「置換基」として述べたものが挙げられる。

$R^{a3}$ としては置換基を有していてもよいフェニル基が好ましい。

#### 【0022】

$R^{a4}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基は $R^{a1}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基と同様なものが挙げられ、また $R^{a4}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基は $R^{a3}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基と同様なものが挙げられる。

$R^{a4}$ で示される「置換基を有していてもよいアルコキシ基」における「アルコキシ基」としては、たとえばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシなど $C_{1-6}$ アルコキシが好ましく、該「置換基」としては、例えばシクロアルキル基（例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等の $C_{3-6}$ シクロアルキル基等）、アリール基（例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基、好ましくはフェニル- $C_{1-4}$ アルキル基等）、複素環基（例えば前記した $R^{a1}$ で示される「置換されていてもよい炭化水素基」における置換基としての「複素環基」と同様のもの等）等が

挙げられる。該低級アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基、複素環基は置換基を有していてもよく、その置換基としては、例えば水酸基、置換されていてもよいアミノ基〔該アミノ基は、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル、ベンゾイル等のアリールカルボニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の $C_{1-6}$ アルキルスルホニル等）等の1又は2個を置換基として有していてもよい。〕、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、ニトロ基、シアノ基、1ないし5個のハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）で置換されていてもよい低級アルキル基、1ないし5個のハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）で置換されていてもよい低級アルコキシ基等が挙げられる。該低級アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等が挙げられ、特にメチル、エチル等が好ましい。該低級アルコキシ基としては、例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等が挙げられ、特にメトキシ、エトキシ等が好ましい。また、これらの置換基は、同一又は異なって1又は2ないし3個（好ましくは1又は2個）置換しているのが好ましい。

$R^{a4}$ で示される「置換されていてもよいアリールオキシ基」における「アリール基」としては、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル等の $C_{6-14}$ アリール基等が挙げられ、該「置換基」としては、低級アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等）、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アミノ基、水酸基、シアノ基、アミジノ基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に1又は2個置換していてもよい。

【0023】

$R^{a4}$ で示される「置換基を有していてもよいアミノ基」における「置換基」としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（ $C_{1-6}$ アルカノイル（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等）、ベンゾイル等）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-6}$ アルコキシカルボニル（例えばトリフルオロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリフルオロエトキシカルボニル、トリクロロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリクロロエトキシカルボニル等）等が挙げられるが、置換基としての「置換されていてもよいアミノ基」における「アミノ基」は、置換されていてもよいイミドイル基（例えば、 $C_{1-6}$ アルキルイミドイル、ホルミルイミドイル、アミジノ等）などで置換されていてもよく、また、2個の置換基が窒素原子と一緒になって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノ基としては、例えば1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、4-モルホリニル、1-ピペラジニル及び4位に低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基等）、アリール基（例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等）等を有していてもよい1-ピペラジニル等の3～8員（好ましくは5～6員）の環状アミノなどが挙げられる。

$R^{a4}$ としては $C_{1-3}$ アルキル、置換基を有していてもよいフェニル、3-ピリジル、4-ピリジル等が好ましい。

$R^{a5}$ で示される炭化水素基としては、 $R^{a1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「炭化水素基」として述べたものが挙げられるが、好ましくはたとえば、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチルなど炭素数1ないし4の低級アルキルが好ましい。

$Y^{a-}$ で示されるカウンターアニオンとしては、たとえば $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$ 、 $NO_3^-$ 、 $SO_4^{2-}$ 、 $PO_4^{3-}$ 、 $CH_3SO_3^-$ などが挙げられる。

$E^a$ で示されるオキソ基以外の置換基を有していてもよい2価の鎖状炭化水素



基における 2 価の鎖状炭化水素基としては例えば、メチレン、エチレン等の  $C_{1-6}$  アルキレン、エテニレン等の  $C_{2-6}$  アルケニレン、エチニレン等の  $C_{2-6}$  アルキニレン等が挙げられる。好ましいものは  $C_{2-5}$  アルキレンであり、もっとも好ましいものはトリメチレンである。

## 【 0 0 2 4 】

該 2 価の炭化水素基の置換基は、オキシ基以外のものであればよく、その具体例としては、たとえば、置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、エステル化されていてもよいカルボキシル基、置換されていてもよいカルバモイル基もしくはチオカルバモイル基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい水酸基、置換されていてもよいチオール（メルカプト）基、カルボン酸由来のアシル基、スルホン酸由来のアシル基、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素など）、ニトロ、シアノなどが挙げられる。置換基の数が 1 ～ 3 であってもよい。これらの置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、エステル化されていてもよいカルボキシル基、置換されていてもよいカルバモイル基もしくはチオカルバモイル基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい水酸基、置換されていてもよいチオール（メルカプト）基、カルボン酸由来のアシル基、スルホン酸由来のアシル基は、前記  $R^a$  3 で示される置換基を有していてもよい複素環基における置換基として述べたものと同様なものが挙げられる。

$Q^a$  および  $R^a$  で示される置換基を有していてもよい 2 価の  $C_{1-3}$  鎖状炭化水素基における  $C_{1-3}$  鎖状炭化水素基としては、 $E^a$  で示されるオキシ基以外の置換基を有していてもよい 2 価の鎖状炭化水素基における 2 価の鎖状炭化水素基のうち、炭素数 1 ～ 3 のものが挙げられる。

$Q^a$  および  $R^a$  で示される置換基を有していてもよい 2 価の  $C_{1-3}$  鎖状炭化水素基における置換基としては、 $E^a$  で示されるオキシ基以外の置換基を有していてもよい 2 価の鎖状炭化水素基における置換基と同様なものが挙げられる。

$J^a$  はメチンまたは窒素原子を示すがメチンであるのが好ましい。

$G^{a1}$  は結合手、CO または  $SO_2$  を示すが、CO または  $SO_2$  が好ましい。

$G^{a2}$  は CO,  $SO_2$ ,  $NHCO$ ,  $CONH$  または  $OCO$  を示すが、なかでも CO,  $NHCO$  または  $OCO$  が好ましい。

【0025】

尚、一般式 (I) で表わされる化合物またはその塩は水和物であってもよい。

(I-1)  $R^{a1}$  が水素原子、下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 2 群から選ばれた炭化水素基、下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい 3～8 員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基であり、 $R^{a2}$  が下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 2 群から選ばれた炭化水素基または下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい 3～8 員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基を示すか、または  $R^{a1}$  と  $R^{a2}$  が結合して  $A^a$  と共に下記第 a 3 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 4 群から選ばれた複素環基を形成してもよく、 $A^a$  が N または  $N^+-R^{a5}$ 、 $Y^{a-}$  ( $Y^{a-}$  が  $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$ 、 $NO_3^-$ 、 $SO_4^{2-}$ 、 $PO_4^{3-}$  または  $CH_3SO_3^-$  であり、 $R^{a5}$  は下記第 a 2 群から選ばれた炭化水素基を示す)、 $R^{a3}$  が下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 5 群から選ばれた環状炭化水素基または下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 6 群から選ばれた複素環基、 $R^{a4}$  が水素原子、下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 2 群から選ばれた炭化水素基、下記第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 6 群から選ばれた複素環基、下記第 a 7 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシ基、下記第 a 8 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{6-14}$  アリールオキシ基、下記第 a 9 群から選ばれた置換基を有していてもよいアミノ基または下記第 a 10 群から選ばれた環状アミノ基であり、 $E^a$  が下記第 a 11 群から選ばれたオキシ基以外の置換基を有していてもよい下記第 a 12 群から選ばれた 2 価の鎖状炭化水素基であり、 $Q^a$  および  $R^a$  がそれぞれ結合手または下記第 a 11 群から選ばれた置換基を有していてもよい下記第 a 13 群から選ばれた 2 価の  $C_{1-3}$  鎖状炭化水素である化合物、

【0026】

## 第 a 1 群

(1) 第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルキル基、  
 (2) 第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{2-6}$  アルケニル基、  
 (3) 第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{2-6}$  アルキニル基、  
 (4) 第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{6-14}$  アリー  
 ル基、(5) 第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-7}$  シクロ  
 アルキル基、(6) 第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-6}$   
 シクロアルケニル基、(7) 第 a 1 5 群から選ばれた基で置換されていてもよい  
 第 a 1 6 群から選ばれた複素環基、(8) 置換基として  $C_{1-6}$  アルキルイミド  
 イル、ホルミルイミドイル、アミジノまたは第 a 1 7 群から選ばれた基を有して  
 いてもよいアミノ基、(9) 第 a 1 0 群から選ばれた環状アミノ基、(10) 第  
 a 1 7 群から選ばれた基で置換されていてもよいイミドイル基、(11) 第 a 1  
 7 群から選ばれた基で置換されていてもよいアミジノ基、(12) 第 a 1 7 群か  
 ら選ばれた基で置換されていてもよい水酸基、(13) 第 a 1 7 群から選ばれた  
 基で置換されていてもよいチオール基、(14) カルボキシル基、(15) 第 a  
 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシカルボニル  
 基、(16) 第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{7-12}$  アリ  
 ールオキシカルボニル基、(17) 第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されてい  
 てもよい  $C_{7-10}$  アラルキルオキシカルボニル基、(18) カルバモイル基  
 、(19) 第 a 1 9 群から選ばれた基で置換されたモノ置換カルバモイル基、(  
 20) 第 a 1 9 群から選ばれた 1 個と第 a 2 0 群から選ばれた 1 個で置換された  
 ジ置換カルバモイル基、(21) 第 a 2 1 群から選ばれた環状アミノカルバモイ  
 ル基、(22) チオカルバモイル基、(23) 第 a 1 9 群から選ばれた基で置換  
 されたモノ置換チオカルバモイル基、(24) 第 a 1 9 群から選ばれた 1 個と第  
 a 2 0 群から選ばれた 1 個で置換されたジ置換チオカルバモイル基、(25) 第  
 a 2 1 群から選ばれた環状アミノチオカルバモイル基、スルファモイル基、(2  
 6) 第 a 1 9 群から選ばれた基で置換された N-モノ置換スルファモイル基、(  
 27) 第 a 1 9 群から選ばれた 1 個と第 a 2 0 群から選ばれた 1 個で置換された  
 N,N-ジ置換スルファモイル基、(28) 第 a 2 2 群から選ばれた環状アミノ

スルホニル基、(29) ハロゲン原子、(30) シアノ基、(31) ニトロ基、  
 (32) 第a22群から選ばれたスルホン酸由来のアシル基、(33) ホルミル  
 基、(34)  $C_{2-6}$  アルカノイル、(35)  $C_{7-12}$  アリールカルボニル、  
 (36) 第a23群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルキルス  
 ルフィニル基および(37) 第a23群から選ばれた基で置換されていてもよい  
 $C_{6-14}$  アリールスルフィニル基

【0027】

#### 第a2群

(1)  $C_{1-10}$  アルキル基、(2)  $C_{2-6}$  アルケニル基、(3)  $C_{2-6}$  ア  
 ルキニル基、(4) ベンゼン環が縮合していてもよい  $C_{3-9}$  シクロアルキル基  
 、(5)  $C_{3-6}$  シクロアルケニル基、(6)  $C_{4-6}$  シクロアルカンジエニル  
 基および(7)  $C_{6-14}$  アリール基

#### 第a3群

(1) 水酸基、(2) シアノ基、(3) ニトロ基、(4) アミノ基、(5) オキ  
 ソ基、(6) ハロゲン原子および(7) 一般式： $-B^1 R^{aa}$  [式中、 $R^{aa}$ は第  
 a1群から選ばれた置換基を有していてもよい第a2群から選ばれた炭化水素基  
 、または第a1群から選ばれた置換基を有していてもよい第a6群から選ばれた  
 複素環基を、 $B^1$ は結合手(単結合)、 $-CR^{ab}R^{aC}-$ 、 $-COO-$ 、 $-CO-$ 、  
 $-CR^{ab}(OH)-$ 、 $-CR^{ab}R^{aC}-S-$ 、 $-CR^{ab}R^{aC}-SO_2-$ 、  
 $-CO-NR^{ab}-$ 、 $-CS-NR^{ab}-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-CS-S-$ 、 $-CO-NR^{ab}-C$   
 $O-NR^{aC}-$ 、 $-C(=NH)-NR^{ab}-$ 、 $-NR^{ab}-$ 、 $-NR^{ab}-CO-$ 、 $-NR^{ab}-$   
 $CS-$ 、 $-NR^{ab}-CO-NR^{aC}-$ 、 $-NR^{ab}-CS-NR^{aC}-$ 、 $-NR^{ab}-CO-$   
 $O-$ 、 $-NR^{ab}-CS-O-$ 、 $-NR^{ab}-CO-S-$ 、 $-NR^{ab}-CS-S-$ 、 $-NR^{ab}-$   
 $C(=NH)-NR^{aC}-$ 、 $-NR^{ab}-SO_2-$ 、 $-NR^{ab}-NR^{aC}-$ 、 $-O-$ 、 $-O-CO$   
 $-$ 、 $-O-CS-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-O-CO-NR^{ab}-$ 、 $-O-C(=NH)-NR^{ab}-$ 、  
 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-SO_2-NR^{ab}-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-S-CS-$ 、 $-S-CO-N$   
 $R^{ab}-$ 、 $-S-CS-NR^{ab}-$ および $-S-C(=NH)-NR^{ab}-$  (ただし、 $R^{ab}$ 、  
 $R^{aC}$ は水素原子、第a14群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$   
 アルキル基、第a14群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{2-6}$  アルケ

ニル基、第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{2-6}$  アルキニル基、第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{6-14}$  アリール基、第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-7}$  シクロアルキル基、第 a 1 4 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-6}$  シクロアルケニル基、第 a 1 群から選ばれた基で置換されていてもよい第 a 6 群から選ばれた複素環基、第 a 2 2 群から選ばれたスルホン酸由来のアシル基、 $C_{1-6}$  アルカノイル、 $C_{7-12}$  アリールカルボニル基を示す) ] で表される基

#### 第 a 4 群

1 個の窒素原子の他にさらに窒素原子、酸素原子、イオウ原子を含んでいてもよい環である (1) 単環式複素環基、(2) ベンゼンが縮合した縮合環式複素環および (3) スピロ環式複素環

#### 第 a 5 群

(1) ベンゼン環が縮合していてもよい  $C_{3-9}$  シクロアルキル、(2)  $C_{3-6}$  シクロアルケニル基、(3)  $C_{4-6}$  シクロアルカンジエニル基および (4)  $C_{6-14}$  アリール基

【0028】

#### 第 a 6 群

環系を構成する原子 (環原子) として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子 1 ないし 3 種を少なくとも 1 個含む (1) 第 a 2 4 群から選ばれた 5 ないし 6 員の芳香族単環式複素環基、(2) 第 a 2 6 群から選ばれた 8 ~ 12 員の芳香族縮合複素環基および (3) 第 a 2 5 群から選ばれた 3 ~ 8 員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基 (脂肪族複素環基)

#### 第 a 7 群

第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-6}$  シクロアルキル基、第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{6-10}$  アリール基、第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{7-10}$  アラルキル基および第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい第 a 1 6 群から選ばれた複素環基

#### 第 a 8 群

$C_{1-6}$  アルコキシ基、ハロゲン原子、 $C_{1-6}$  アルキル基、アミノ基、水酸基、シアノ基およびアミジノ基

#### 第 a 9 群

(1)  $C_{1-6}$  アルキル基、(2)  $C_{1-6}$  アルカノイル、(3) ベンゾイル、(4) ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシカルボニル、(5)  $C_{1-6}$  アルキルイミドイル、(6) ホルミルイミドイルおよび (7) アミジノ

#### 第 a 10 群

(1) 1-アゼチジニル、(2) 1-ピロリジニル、(3) 1-ピペリジニル、(4) 4-モルホリニルおよび (5) 第 a 27 群から選ばれた置換基を有していてもよい 1-ピペラジニル

#### 第 a 11 群

(1) 第 a 14 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルキル基、(2) 第 a 14 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{6-14}$  アリール基、(3) 第 a 14 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-7}$  シクロアルキル基、(4) 第 a 14 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-6}$  シクロアルケニル基、(5) カルボキシ基、(6) 第 a 18 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシカルボニル基、(7) 第 a 18 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{7-12}$  アリールオキシカルボニル基、(8) 第 a 18 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{7-10}$  アラルキルオキシカルボニル基、(9) カルバモイル基、(10) 第 a 19 群から選ばれた基で置換されたモノ置換カルバモイル基、(11) 第 a 19 群から選ばれた 1 個と第 a 20 群から選ばれた 1 個で置換されたジ置換カルバモイル基、(12) 第 a 21 群から選ばれた環状アミノカルバモイル基、(13) チオカルバモイル基、(14) 第 a 19 群から選ばれた基で置換されたモノ置換チオカルバモイル基、(15) 第 a 19 群から選ばれた 1 個と第 a 20 群から選ばれた 1 個で置換されたジ置換チオカルバモイル基、(16) 第 a 21 群から選ばれた環状アミノチオカルバモイル基、(17) 置換基として  $C_{1-6}$  アルキルイミドイル、ホルミルイミドイル、アミジノ、第 a 17 群から選ばれた基を有していてもよいアミノ基、(18) 第 a 10 群から選ばれた環状アミノ基、(19) 第 a 17 群から

選ばれた基で置換されていてもよい水酸基、(20) 第 a 1 7 群から選ばれた基で置換されていてもよいチオール基、(21)  $C_1-6$  アルカノイル、(22)  $C_7-12$  アリールカルボニル、(23) 第 a 2 2 群から選ばれたスルホン酸由来のアシル基、(24) ハロゲン、(25) ニトロおよび(26) シアノ

## 【0029】

## 第 a 1 2 群

$C_1-6$  アルキレン、 $C_2-6$  アルケニレンおよび $C_2-6$  アルキニレン

## 第 a 1 3 群

$C_1-3$  アルキレン、 $C_2-3$  アルケニレンおよび $C_2-3$  アルキニレン

## 第 a 1 4 群

(1) ハロゲンで置換されていてもよい $C_1-6$  アルコキシ基、(2) 置換基としてハロゲンまたはカルバモイルを有していてもよいフェノキシ、(3) ハロゲン原子、(4)  $C_1-6$  アルキル基、(5) ハロゲン置換 $C_1-4$  アルキル基、(6)  $C_3-8$  シクロアルキル、(7) アミノ基、(8) 置換基としてカルバモイル、 $C_1-4$  アルキルおよび $C_1-4$  アルキルスルホニルの1個または2個を有するアミノ基、(9)  $C_1-6$  アルキルで置換されていてもよいカルバモイル基、(10) ホルミル、(11)  $C_2-6$  アルカノイル基、(12)  $C_6-14$  アリール基、(13)  $C_6-14$  アリールカルボニル、(14)  $C_7-13$  アラルキルカルボニル、(15) 水酸基、(16)  $C_2-5$  アルカノイルオキシ、(17)  $C_7-13$  アラルキルカルボニルオキシ、(18) ニトロ基、(19) スルファモイル基、(20)  $N-C_1-4$  アルキルスルファモイル、(21) フェニルチオ、(22)  $C_1-4$  アルキルフェニルチオ、(23)  $-N=N-$ フェニル、(24) シアノ基、(25) オキソ基、(26) アミジノ基、(27) カルボキシ基、(28)  $C_1-4$  アルコキシカルボニル、(29)  $C_1-6$  アルキルチオ、(30)  $C_1-6$  アルキルスルフィニル、(31)  $C_1-6$  アルキルスルホニル、(32)  $C_6-14$  アリールチオ、(33)  $C_6-14$  アリールスルフィニル、(34)  $C_6-14$  アリールスルホニルおよび(35) 第 a 6 群から選ばれた複素環基

## 第 a 1 5 群

$C_1-6$  アルキル基、 $C_1-6$  アルカノイル、 $C_7-13$  アリールカルボニル、 $C_1-6$  アルキルスルホニル、アミノスルホニル、モノ- $C_1-6$  アルキルアミノスルホニル、ジ- $C_1-6$  アルキルアミノスルホニルおよびハロゲン化 $C_1-4$  アルキル

#### 第 a 1 6 群

環系を構成する原子（環原子）として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種を少なくとも1個含む（1）第 a 2 4 群および第 a 2 6 群から選ばれた芳香族複素環基および（2）第 a 2 5 群から選ばれた飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基

#### 第 a 1 7 群

（1）置換基としてハロゲンまたは $C_1-6$  アルコキシを有していてもよい $C_1-6$  アルキル基、（2） $C_6-12$  アリール基、（3） $C_1-4$  アルキル置換 $C_6-12$  アリール基、（4）置換基としてハロゲンまたは $C_1-6$  アルコキシを有していてもよい $C_3-8$  シクロアルキル基、（5） $C_1-6$  アルコキシ基、（6） $C_1-6$  アルカノイル、（7） $C_7-13$  アリールカルボニル、（8） $C_1-4$  アルキル置換 $C_7-13$  アリールカルボニル、（9） $C_1-6$  アルキルスルホニル、（10） $C_6-14$  アリールスルホニル、（11）アミノスルホニル、（12） $C_1-4$  アルキルでモノまたはジ置換された置換アミノスルホニルおよび（13）ハロゲン化されていてもよい $C_1-6$  アルコキシカルボニル

【0030】

#### 第 a 1 8 群

（1）水酸基、（2）アミノ基、（3）第 a 2 8 群から選ばれた基でモノまたはジ置換されたアミノ基、（4）ハロゲン原子、（5）ニトロ基、（6）シアノ基、（7）ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1-6$  アルキル基および（8）ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1-6$  アルコキシ基

#### 第 a 1 9 群

第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい $C_1-6$  アルキル基、第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい $C_3-6$  シクロアルキル基、第 a 1 8 群から選ばれた基で置換されていてもよい $C_6-10$  アリール基、第 a 1 8 群



から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{7-10}$  アラルキル基、第 a 18 群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシ基および第 a 18 群から選ばれた基で置換されていてもよい第 a 16 群から選ばれた複素環基

#### 第 a 20 群

$C_{1-6}$  アルキル基、 $C_{3-6}$  シクロアルキル基および  $C_{7-10}$  アラルキル基

#### 第 a 21 群

1-アゼチジニルカルボニル、1-ピロリジニルカルボニル、1-ピペリジニルカルボニル、4-モルホリニルカルボニルおよび第 a 27 群から選ばれた基で置換されていてもよい 1-ピペラジニルカルボニル

#### 第 a 22 群

第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-10}$  アルキルスルホニル、第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{2-6}$  アルケニルスルホニル、第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{2-6}$  アルキニルスルホニル、第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{3-9}$  シクロアルキルスルホニル、第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{3-9}$  シクロアルケニルスルホニル、第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{6-14}$  アリールスルホニルおよび第 a 18 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{7-10}$  アラルキルスルホニル

#### 第 a 23 群

$C_{1-6}$  アルコキシ基、ハロゲン原子、 $C_{1-6}$  アルキル基、アミノ基、水酸基、シアノ基およびアミジノ基

#### 第 a 24 群

フリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリアゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニルおよびトリアジニル

【0031】

## 第 a 2 5 群

オキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニルおよびピペラジニル

## 第 a 2 6 群

ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾピラニル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、ベンゾジオキサソリル、ベンゾイミダゾリル、2,1,1-ベンズオキサジアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔1,5-a〕ピリジル、ピラゾロ〔3,4-b〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-b〕ピリダジニル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリミジニル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-a〕ピリジルおよび1,2,4-トリアゾロ〔4,3-b〕ピリダジニル

## 第 a 2 7 群

C<sub>1-6</sub> アルキル基、C<sub>7-10</sub> アラルキル基およびC<sub>6-10</sub> アリール基

## 第 a 2 8 群

C<sub>1-6</sub> アルキル基、C<sub>1-6</sub> アルカノイル、C<sub>7-13</sub> アリールカルボニルおよびC<sub>1-6</sub> アルキルスルホニル

(I-2) R<sup>a1</sup> および R<sup>a2</sup> で示される第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい3~8員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基が第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 a 2 5 群から選ばれた3~8員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基であり、R<sup>a1</sup> と R<sup>a2</sup> が結合して A<sup>a</sup> と共に形成される第 a 3 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 a 4 群から選ばれた複

素環基が第a 3群から選ばれた置換基を有していてもよい第a 29群から選ばれた環状アミノ基である上記(I-1)記載の化合物、

#### 第a 29群

1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、1-ホモピペリジニル、ヘプタメチレンイミノ、1-ピペラジニル、1-ホモピペラジニル、4-モルホリニル、4-チオモルホリニル、2-イソインドリニル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-2-イソキノリル、1, 2, 4, 5-テトラヒドロ-3H-3-ベンゾアゼピン-3-イルおよびインデン-1-スピロ-4'-ピペリジン-1'-イル

(I-3)  $R^{a1}$ と $R^{a2}$ が結合して $A^a$ と共に第a 3群から選ばれた置換基を有していてもよい第a 4群から選ばれた3~8員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基を形成している上記(I-1)記載の化合物、

(I-4)  $R^{a1}$ と $R^{a2}$ が結合して $A^a$ と共に、第a 3群から選ばれた置換基を有していてもよく、窒素原子1または2個を含む3~8員の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基を形成している上記(I-1)記載の化合物、

#### 【0032】

(I-5)  $-A^a R^{a1} R^{a2}$ で表される基が第a 3群から選ばれた置換基を有していてもよい(1)ピペリジニルまたは(2)ピペラジニルである上記(I-3)記載の化合物、

(I-6)  $-A^a R^{a1} R^{a2}$ で示される基が式：

#### 【化17】

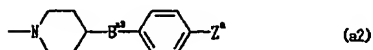


[式中、 $L^a$ はメチンまたは窒素原子を、 $B^{a2}$ は結合手、 $-CH_2-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-SO-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^{ab1}-SO_2-$  (ただし、 $R^{ab1}$ は水素原子、 $C_{1-6}$ アルキル基、 $C_{2-6}$ アルケニル、 $C_{2-6}$ アルキニルまたは $C_{3-6}$ シクロアルキル基を示す)、 $-CH(OH)-$ 、 $-NR^{ab2}-$  (ただし $R^{ab2}$ は水素原子または $C_{2-4}$ アルカノイル基を示す)、 $-NR^{ab1}-CO-$  (ただし $R^{ab1}$ は前記と同意義である)、 $-NR^{ab1}-CO-O-$  (ただし $R^{ab1}$ は前記と同意義である)、 $-CH_2S$

O<sub>2</sub>-または-CH<sub>2</sub>S-を、R<sup>a a</sup>は第a 1群から選ばれた置換基を有しているもよい第a 2群から選ばれた炭化水素基または第a 1群から選ばれた置換基を有しているもよい第a 6群から選ばれた複素環基を示す]で表される基である上記(I-3)記載の化合物、

(I-7) -A<sup>a</sup>R<sup>a 1</sup>R<sup>a 2</sup>で示される基が式：

【化18】



(式中、B<sup>a 3</sup>は-CH<sub>2</sub>-, -SO<sub>2</sub>-, -SO-, -S-, -O-, -CO-, -NR<sup>a b 1</sup>-SO<sub>2</sub>- (ただし、R<sup>a b 1</sup>は水素原子、C<sub>1-4</sub>アルキル基、C<sub>2-6</sub>アルケニル、C<sub>2-6</sub>アルキニルまたはC<sub>3-6</sub>シクロアルキル基を示す)、-NR<sup>a b 1</sup>-CO-, -NR<sup>a b 1</sup>-CO-O- (ただし、R<sup>a b 1</sup>は前記と同意義である)を、Z<sup>a</sup>はハロゲン、SO<sub>2</sub>NR<sup>a b 3</sup>R<sup>a b 4</sup> (ただし、R<sup>a b 3</sup>およびR<sup>a b 4</sup>は同一または異なって、(1)置換基としてハロゲン、水酸基またはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>1-6</sub>アルキル、(2)置換基としてハロゲンまたはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>3-8</sub>シクロアルキル、(3)C<sub>1-6</sub>アルコキシまたは(4)水素原子を示すかまたは、R<sup>a b 3</sup>とR<sup>a b 4</sup>が窒素原子とともに環状アミノ基を形成してもよい)、SO<sub>2</sub>R<sup>a b 5</sup>、(ただし、R<sup>a b 5</sup>は(1)置換基としてハロゲン、水酸基またはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>1-6</sub>アルキル、(2)置換基としてハロゲンまたはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>3-8</sub>シクロアルキルを示す)、CONR<sup>a b 3</sup>R<sup>a b 4</sup> (ただし、R<sup>a b 3</sup>およびR<sup>a b 4</sup>は前記と同意義である)または-NR<sup>a b 7</sup>-SO<sub>2</sub>R<sup>a b 6</sup> (ただし、R<sup>a b 6</sup>は(1)置換基としてハロゲンまたはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>1-6</sub>アルキル、(2)置換基としてハロゲンまたはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>3-8</sub>シクロアルキルを、R<sup>a b 7</sup>は(1)置換基としてハロゲンまたはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>1-6</sub>アルキル、(2)置換基としてハロゲンまたはC<sub>1-6</sub>アルコキシを有しているもよいC<sub>3-8</sub>シクロアルキルまたは(3)水素原子を示す)、C<sub>1-6</sub>アルコキシ、C<sub>2-4</sub>アルカノイルで置換されていてよいアミノ、ニトロ、シアノ、テトラゾリルまたは

モルホリニルを示す)で表される基である上記(I-3)記載の化合物、

【0033】

(I-8)  $R^{a3}$  が第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{6-14}$  アリール基である上記(I-1)記載の化合物、

(I-9)  $R^{a3}$  が第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよいフェニル基である上記(I-1)記載の化合物、

(I-10)  $E^a$  が、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$  または  $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2-$  である化合物、

(I-11)  $E^a$  が  $-CH_2CH_2CH_2-$  である化合物、

(I-12)  $G^{a2}$  が  $CO$ 、 $SO_2$ 、 $CONH$  または  $OCO$  である化合物、

(I-13)  $G^{a2}$  が  $CO$  または  $NHCO$  である化合物、

(I-14)  $G^{a2}$  が  $CO$  である化合物、

(I-15)  $J^a$  がメチンである化合物、

(I-16)  $G^{a1}$  が  $CO$  または  $SO_2$  である化合物、

(I-17)  $R^{a4}$  が第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 a 2 群から選ばれた炭化水素基、第 a 1 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 a 6 群から選ばれた複素環基、第 a 7 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシ基、または第 a 9 群から選ばれた置換基を有していてもよいアミノ基である上記(I-1)記載の化合物、

(I-18)  $R^{a4}$  が  $C_{1-3}$  アルキルである化合物、

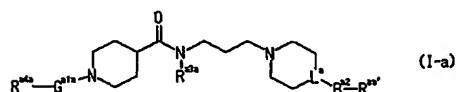
(I-19)  $R^{a4}$  がメチルである化合物、

(I-20)  $Q^a$  および  $R^a$  がそれぞれ  $-CH_2CH_2-$  である化合物、

(I-21)  $n_a$  が 0 である化合物、

(I-22) 式：

【化19】



【式中、 $R^{a4}$  は、(1) 置換基としてハロゲン、 $C_{1-6}$  アルコキシ、オキソ、アミノ、フェニル、ピリジルまたはテトラゾリルを有していてもよい  $C_{1-}$

$C_6$  アルキル基、(2)  $C_1-6$  アルケニル基、(3) 置換基としてハロゲン、 $C_1-6$  アルキルまたは  $C_1-6$  アルコキシを有していてもよい  $C_3-8$  シクロアルキル基、(4) 置換基としてハロゲン、 $C_1-6$  アルキル、 $C_1-6$  アルコキシ、ニトロ、シアノ、水酸基、 $C_1-4$  アルカノイルアミノ、カルバモイルまたはスルファモイルを有していてもよいフェニル基、(5)  $C_1-6$  アルキルで置換されていてもよいアミノ基、(6) フェニルで置換されていてもよい  $C_1-6$  アルコキシ基、(7)  $C_3-8$  シクロアルキルオキシ基、(8) 置換基としてハロゲン、 $C_1-6$  アルキルまたは水酸基を有していてもよい複素環基を、 $G^{a1}$  は  $CO$  または  $SO_2$  を、 $R^{a3a}$  は置換基として (1) ハロゲン、(2) ハロゲンで置換されていてもよい  $C_1-6$  アルキル、(3) ハロゲンで置換されていてもよい  $C_1-6$  アルコキシ、(4)  $C_1-6$  アルキルチオ、(5)  $C_1-6$  アルキルスルホニルを有していてもよい  $C_6-10$  アリール基を、 $L^a$  はメチンまたは窒素原子を、 $B^{a2}$  は結合手、 $-CH_2-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-SO-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^{ab1}-SO_2-$  (ただし、 $R^{ab1}$  は前記と同意義である)、 $-CH(OH)-$ 、 $-NR^{ab2}-$  (ただし  $R^{ab2}$  は水素原子または  $C_2-4$  アルカノイル基を示す)、 $-NR^{ab1}-CO-$  (ただし  $R^{ab1}$  は前記と同意義である)、 $-NR^{ab1}-CO-O-$  (ただし  $R^{ab1}$  は前記と同意義である)、 $-CH_2SO_2-$  または  $-CH_2S-$  を、 $R^{aa}$  は①置換基としてハロゲン、 $SO_2NR^{ab3}R^{ab4}$  (ただし、 $R^{ab3}$  および  $R^{ab4}$  は前記と同意義である)、 $SO_2R^{ab5}$ 、(ただし、 $R^{ab5}$  は (1) 置換基としてハロゲン、水酸基または  $C_1-6$  アルコキシを有していてもよい  $C_1-6$  アルキル、(2) 置換基としてハロゲンまたは  $C_1-6$  アルコキシを有していてもよい  $C_3-8$  シクロアルキルを示す)、 $CONR^{ab3}R^{ab4}$  (ただし、 $R^{ab3}$  および  $R^{ab4}$  は前記と同意義である) または  $-NR^{ab7}-SO_2R^{ab6}$  (ただし、 $R^{ab6}$  は前記と同意義である)、 $C_1-6$  アルコキシ、 $C_2-4$  アルカノイルで置換されていてもよいアミノ、ニトロ、シアノ、テトラゾリルまたはモルホリニルを有していてもよい芳香族炭化水素基または②同置換基で置換されていてもよい芳香族複素環基をそれぞれ示す] で表される化合物またはその塩、

【0034】

(I-23)  $R^{a3a}$  が置換基としてハロゲン、トリフルオロメチルまたは  $C_{1-6}$  アルキルを有していてもよいフェニル基である上記 (I-22) 記載の化合物、

(I-24)  $L^a$  がメチンである上記 (I-22) 記載の化合物、

(I-25)  $B^{a2}$  が  $-CH_2-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-SO-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^{ab1}-SO_2-$ 、 $-NR^{ab1}-CO-$ 、 $-NR^{ab1}-CO-O-$ 、  
(ただし、 $R^{ab1}$  は前記と同意義である) である上記 (I-22) 記載の化合物、

(I-26)  $R^{aa'}$  が置換基として (1) ハロゲン、(2)  $SO_2R^{ae}$  (ただし  $R^{ae}$  は  $C_{1-6}$  アルキルまたは  $C_{3-8}$  シクロアルキルを示す)、(3)  $N(R^{ad})SO_2R^{ae}$  (ただし、 $R^{ad}$  は水素原子または  $C_{1-4}$  アルキルを示し、 $R^{ae}$  は前記と同意義である)、(4)  $SO_2NR^{af}R^{ag}$  (ただし  $R^{af}$  および  $R^{ag}$  はそれぞれ同一または異なって水素原子または  $C_{1-6}$  アルキルを示すかまたは、 $R^{af}$  と  $R^{ag}$  が窒素原子とともに環状アミノ基を形成してもよい) または (5)  $CONR^{af}R^{ag}$  (ただし  $R^{af}$  および  $R^{ag}$  はそれぞれ同一または異なって水素原子または  $C_{1-6}$  アルキルを示すかまたは、 $R^{af}$  と  $R^{ag}$  が窒素原子とともに環状アミノ基を形成してもよい) を有していてもよいフェニルである上記 (I-22) 記載の化合物、

(I-27)  $B^{a2}$  が  $SO_2$ 、 $CH_2$  または  $N(R^{ad})-SO_2$  (ただし、 $R^{ad}$  は水素原子または  $C_{1-4}$  アルキルを示す) であり、 $R^{aa'}$  が置換基として (1) ハロゲン、(2)  $SO_2R^{ae}$  (ただし  $R^{ae}$  は  $C_{1-6}$  アルキルまたは  $C_{3-8}$  シクロアルキルを示す)、(3)  $N(R^{ad})SO_2R^{ae}$  (ただし、 $R^{ad}$  は水素原子または  $C_{1-4}$  アルキルを示し、 $R^{ae}$  は前記と同意義である)、(4)  $SO_2NR^{af}R^{ag}$  (ただし  $R^{af}$  および  $R^{ag}$  はそれぞれ同一または異なって水素原子または  $C_{1-6}$  アルキルを示すかまたは、 $R^{af}$  と  $R^{ag}$  が窒素原子とともに環状アミノ基を形成してもよい) または (5)  $CONR^{af}R^{ag}$  (ただし  $R^{af}$  および  $R^{ag}$  はそれぞれ同一または異なって水素原子または  $C_{1-6}$  アルキルを示すかまたは、 $R^{af}$  と  $R^{ag}$  が窒素原子とともに環状

アミノ基を形成してもよい)を有していてもよいフェニルであり、 $R^{a3a}$ が置換基としてハロゲン原子または $C_{1-4}$ アルキルから選ばれた1または2個を有するフェニル基である上記(I-22)記載の化合物、

(I-28)  $G^{a1a}$ が $SO_2$ または $CO$ であり、 $L^a$ がメチンであり、 $B^{a2}$ が $SO_2$ または $CH_2$ を、 $R_{aa'}$ が式：

【化20】



(a3)

(式中、 $Z^a$ は $C_{1-4}$ アルキルスルホニル、 $C_{1-4}$ アルキルで置換されていてもよいスルファモイルまたはカルバモイル基を示す)で表される基であり、 $R^{a3a}$ が置換基としてハロゲン原子または $C_{1-4}$ アルキルから選ばれた1または2個を有するフェニル基であり、 $R^{a4a}$ がメチルである上記(I-22)記載の化合物、

が好ましい。

【0035】

$R^{b1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「炭化水素基」としては、例えば脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基等が挙げられる。該脂肪族鎖式炭化水素基としては例えばメチル、エチル、 $n$ -プロピル、イソプロピル、 $n$ -ブチル、イソブチル、 $sec$ -ブチル、 $tert$ -ブチル、 $n$ -ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、1-メチルプロピル、 $n$ -ヘキシル、イソヘキシルなどの $C_{1-6}$ アルキル基などが、該脂環式炭化水素基としては例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどの $C_{3-8}$ シクロアルキル基などが、該アリール基としては例えばフェニル、ナフチル(1-ナフチル、2-ナフチル)などの $C_{6-14}$ アリール基等が好ましい。

$R^{b1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」としては、置換基を有していてもよい炭化水素基、置換基を有していてもよい複素環基、ハロゲン原子(例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素)、置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基、置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルキルチオ基、置換基を有していてもよい $C_{2-6}$ アルコキシカルボニル基、置換基を



有していてもよい $C_{1-6}$ アルカノイル基、置換基を有していてもよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換基を有していてもよいカルバモイル基、置換基を有していてもよいスルファモイル基、スルホン酸由来のアシル基などが挙げられる。

該「置換基を有していてもよい炭化水素基」の「炭化水素基」としては、 $R^{b1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「炭化水素基」と同様なものが挙げられ、なかでも $C_{1-6}$ アルキル基、 $C_{3-8}$ シクロアルキル基、 $C_{6-14}$ アリール基が好ましい。これらの例も $R^{b1}$ で述べたものが挙げられる。該「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」としては、たとえば低級アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等）、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、低級アルキニル基（例えば、ビニル、1-プロペニル、2-プロペニル、イソプロペニル、ブテニル、イソブテニルなどの $C_{1-4}$ アルキニル基）、アミノ基、水酸基、シアノ基、アミジノ基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に1又は3個置換していてもよい。

該「置換基を有していてもよい複素環基」（ $R^{b1}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における置換基）における「複素環基」としては、例えば、環系を構成する原子（環原子）として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種（好ましくは1ないし2種）を少なくとも1個（好ましくは1ないし4個、さらに好ましくは1ないし2個）含む芳香族複素環基、飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）等が挙げられる。

#### 【0036】

該芳香族複素環基としては、芳香族単環式複素環基（例えばフリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリア

ゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、トリアジニル等の5ないし6員の芳香族単環式複素環基)及び芳香族縮合複素環基〔例えばベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾピラニル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-b〕ピリダジニル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリミジニル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-a〕ピリジル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-b〕ピリダジニル等の8~12員の芳香族縮合複素環基(好ましくは、前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基がベンゼン環と縮合した複素環または前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基の同一または異なった複素環2個が縮合した複素環)〕などが挙げられる。

該非芳香族複素環基としては、例えばオキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、ピペラジニル等の3~8員(好ましくは5~6員)の飽和あるいは不飽和(好ましくは飽和)の非芳香族複素環基(脂肪族複素環基)などが挙げられる。

該「置換されていてもよい複素環基」( $R^{b1}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における置換基)における「置換基」としては $R^{b1}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における「置換基」である「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」と同様なものが挙げられる。

【0037】

該「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基」における「 $C_{1-4}$ アルコキシ基」としてはたとえばメトキシ、エトキシ、 $n$ -プロポキシ、イソプロポキシ、 $n$ -ブトキシ、イソブトキシ、 $tert$ -ブトキシなどが、

該「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルキルチオ基」における「 $C_{1-4}$ アルキルチオ基」としては、たとえばメチルチオ、エチルチオ、 $n$ -プロピルチオ、イソプロピルチオ、 $n$ -ブチルチオ、イソブチルチオ、 $tert$ -ブチルチオなどが、該「置換基を有していてもよい $C_{2-6}$ アルコキシカルボニル基」における「 $C_{2-6}$ アルコキシカルボニル基」としては、たとえばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、 $n$ -プロポキシカルボニル、イソプロポキシカルボニル、 $n$ -ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニル、 $tert$ -ブトキシカルボニル、 $n$ -ペンチルオキシカルボニルなどが挙げられる。

該「置換基を有していてもよい $C_{1-6}$ アルカノイル基」における「 $C_{1-6}$ アルカノイル基」としては例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイルなどが挙げられる。該「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基」、該「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルキルチオ基」および該「置換基を有していてもよい $C_{1-6}$ アルコキシカルボニル基」、「置換基を有していてもよい $C_{1-6}$ アルカノイル基」における置換基としては $R^{b1}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における置換基である「置換基を有していてもよい炭化水素基」における置換基と同様なものが挙げられる。

該「置換基を有していてもよいアミノ基」における置換基としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、カルボン酸由来のアシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル）、例えば、ベンゾイル等の $C_{7-15}$ のアリールカルボニル等）、スルホン酸由来のアシル基（例えば、メチルスルホニル、エチルスルホニル等の $C_{1-6}$ アルキルスルホニル）、ハロゲン化されていてもよい $C_{2-6}$ アルコキシカルボニル（例えばトリフルオロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリフルオロエトキシカルボニル、トリクロロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリクロロエトキシカルボニル等）等が挙げられるが、「置換基を有して

いてもよいアミノ基」における「アミノ基」は、置換されていてもよいイミドイル基（例えば、 $C_{1-6}$ アルキルイミドイル、ホルミルイミドイル、アミジノ等）などで置換されていてもよく、また、2個の置換基が窒素原子と一緒になって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノ基としては、例えば1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、4-モルホリニル、1-ピペラジニル及び4位に低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基等）、アリール基（例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等）等を有していてもよい1-ピペラジニル等の3～8員（好ましくは5～6員）の環状アミノ基などが挙げられる。

## 【0038】

該「置換基を有していてもよいカルバモイル基」としては、無置換のカルバモイルの他、N-モノ置換カルバモイル基及びN,N-ジ置換カルバモイル基が挙げられる。

「N-モノ置換カルバモイル基」は窒素原子上に1個の置換基を有するカルバモイル基を意味し、該置換基としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、シクロアルキル基（例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等の $C_{3-6}$ シクロアルキル基等）、アリール基（例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基、好ましくはフェニル- $C_{1-4}$ アルキル基等）、複素環基（例えば前記した $R^{b1}$ で示される「置換されていてもよい炭化水素基」における置換基としての「置換されていてもよい複素環基」の「複素環基」と同様のもの等）等が挙げられる。該低級アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基、複素環基は置換基を有していてもよく、その置換基としては、例えば水酸基、置換されていてもよいアミノ基〔該アミノ基は、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-

ーブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等)、アシル基(例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の  $C_{1-6}$  アルカノイル、例えばベンゾイル等のアリールカルボニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の  $C_{1-6}$  アルキルスルホニル)等の1又は2個を置換基として有していてもよい。]、ハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)、ニトロ基、シアノ基、1ないし5個のハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)で置換されていてもよい低級アルキル基、1ないし5個のハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)で置換されていてもよい低級アルコキシ基等が挙げられる。該低級アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等が挙げられ、特にメチル、エチル等が好ましい。該低級アルコキシ基としては、例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ等の  $C_{1-6}$  アルコキシ基等が挙げられ、特にメトキシ、エトキシ等が好ましい。また、これらの置換基は、同一又は異なって1又は2ないし3個(好ましくは1又は2個)置換しているのが好ましい。

## 【0039】

「*N,N*-ジ置換カルバモイル基」は、窒素原子上に2個の置換基を有するカルバモイル基を意味し、該置換基の一方の例としては上記した「*N*-モノ置換カルバモイル基」における置換基と同様のものが挙げられ、他方の例としては、例えば低級アルキル基(例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等)、 $C_{3-6}$  シクロアルキル基(例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等)、 $C_{7-10}$  アラルキル基(例えばベンジル、フェネチル等、好ましくはフェニル- $C_{1-4}$  アルキル基等)等が挙げられる。また、2個の置換基が窒素原子と一緒にあって環状アミノ基を形成する場合もあり、このような場合の環状アミノカルボニル基としては、例えば1-アゼチジニルカルボニル、1-ピロリジニルカルボニル、1-ピペリジニルカルボニル、4-モルホリニルカルボニル、1-ピペラジニルカルボニル及び4位に低級アルキル基(例えばメチル、

エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等)、アラルキル基(例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基等)、アリール基(例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等)等を有していてもよい1-ピペラジニルカルボニル等の3~8員(好ましくは5~6員)の環状アミノ-カルボニルなどが挙げられる。

該「置換基を有していてもよいスルファモイル基」としては、無置換のスルファモイルの他、N-モノ置換スルファモイル基及びN,N-ジ置換スルファモイル基が挙げられる。

「N-モノ置換スルファモイル基」は窒素原子上に1個の置換基を有するスルファモイル基を意味し、該置換基としては、N-モノ置換カルバモイル基の置換基と同様のものが挙げられる。

「N,N-ジ置換スルファモイル基」は、窒素原子上に2個の置換基を有するスルファモイル基を意味し、該置換基としては、N,N-ジ置換カルバモイル基の置換基と同様のものが挙げられる。

該「スルホン酸由来のアシル基」としては、炭化水素基とスルホニルとが結合したものなどが挙げられるが、好ましくは $C_{1-10}$ アルキルスルホニル、 $C_{2-6}$ アルケニルスルホニル、 $C_{2-6}$ アルキニルスルホニル、 $C_{3-9}$ シクロアルキルスルホニル、 $C_{3-9}$ シクロアルケニルスルホニル、 $C_{6-14}$ アリールスルホニル、 $C_{7-10}$ アラルキルスルホニル等のアシルが挙げられる。具体的にはここでの $C_{1-10}$ アルキルとしては、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル等が挙げられる。 $C_{2-6}$ アルケニルとしては、例えばビニル、アリル、1-プロペニル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-ヘキセニル等が挙げられる。 $C_{2-6}$ アルキニルとしては、例えばエチニル、2-プロピニル、2-ブチニル、5-ヘキシニル等が挙げられる。 $C_{3-9}$ シクロアルキルとしては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチル等が挙げられる。 $C_{3-9}$ シクロアルケニルとしては、例えば1-シクロペンテン-1-イル、2-シクロペンテン-1-イル、3-シクロペンテ

ン-1-イル、3-シクロヘキセン-1-イル、3-シクロオクテン-1-イル等が挙げられる。 $C_{6-14}$ アリールとしてはフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が挙げられる。 $C_{7-10}$ アラルキルスルホニルとしては、例えばベンジル、フェネチル等が挙げられる。スルホニルと結合したこれらの炭化水素基は置換基を有していてもよく、その置換基としては、例えば水酸基、置換されていてもよいアミノ基〔該アミノ基は、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル、例えばベンゾイル等のアリールカルボニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル等の $C_{1-6}$ アルキルスルホニル）等の1又は2個を置換基として有していてもよい。〕、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、ニトロ基、シアノ基、1ないし5個のハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）で置換されていてもよい低級アルキル基、1ないし5個のハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）で置換されていてもよい低級アルコキシ基等が挙げられる。該低級アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等が挙げられ、特にメチル、エチル等が好ましい。該低級アルコキシ基としては、例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等が挙げられ、特にメトキシ、エトキシ等が好ましい。また、これらの置換基は、同一又は異なって1又は2ないし3個（好ましくは1又は2個）置換しているのが好ましい。

#### 【0 0.4 0】

$R^{b2}$ で示される「置換基を有していてもよい環状炭化水素基」における「環状炭化水素基」としては脂環式炭化水素基およびアリール基が挙げられる。

該脂環式炭化水素基としては、例えばシクロアルキル基、シクロアルケニル基、シクロアルカンジエニル基等の飽和又は不飽和の脂環式炭化水素基が挙げられる。該シクロアルキル基としては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シク

ロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル等の $C_3 - 9$ シクロアルキル（好ましくは $C_3 - 8$ シクロアルキル等）等、また1-インダニル、2-インダニルなどの縮合環が挙げられる。該シクロアルケニル基としては、例えば2-シクロペンテン-1-イル、3-シクロペンテン-1-イル、2-シクロヘキセン-1-イル、3-シクロヘキセン-1-イル、1-シクロブテン-1-イル、1-シクロペンテン-1-イル等の $C_3 - 6$ シクロアルケニル基等が挙げられる。該シクロアルカンジエニル基としては、例えば2,4-シクロペンタンジエン-1-イル、2,4-シクロヘキサンジエン-1-イル、2,5-シクロヘキサンジエン-1-イル等の $C_4 - 6$ シクロアルカンジエニル基等が挙げられる。中でもシクロヘキシル等の $C_3 - 8$ シクロアルキル基が好ましい。

該アリール基としては、単環式又は縮合多環式芳香族炭化水素基が挙げられ、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル、4-インダニル、5-インダニル等の $C_6 - 14$ アリール基等が好ましく、中でもフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が特に好ましい。

$R^{b2}$ で示される「置換基を有していてもよい環状炭化水素基」における「置換基」としては $R^{b1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」として述べた「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」と同様なものが挙げられる。

$R^{b2}$ で示される「置換基を有していてもよい複素環基」としては $R^{b1}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」として述べた「置換基を有していてもよい複素環基」と同様なものが挙げられる。

$R^{b3}$ で示されるハロゲン原子としては、たとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが挙げられる。

$R^{b3}$ で示される「置換基を有していてもよいカルバモイル基」、「置換基を有していてもよいフルファモイル基」および「スルホン酸由来のアシル基」は $R^{b1}$ で示される「置換基を有していてもよいカルバモイル基」、「置換基を有していてもよいフルファモイル基」および「スルホン酸由来のアシル基」と同様なものがそれぞれ挙げられる。



$R^{b3}$ で示される「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルキル基」における「 $C_{1-4}$ アルキル基」としてはたとえばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチルなどが挙げられる。

$R^{b3}$ で示される「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基」における「 $C_{1-4}$ アルコキシ基」としては、たとえばメトキシ、エトキシ、プロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*tert*-ブトキシなどが挙げられる。

$R^{b3}$ で示される「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルキル基」、「置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基」における「置換基」としては $R^b$ <sup>1</sup>で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における「置換基」である「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」と同様なものが挙げられる。

$R^{b3}$ で示される「置換基を有していてもよいアミノ基」における置換基としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、カルボン酸由来のアシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル）、例えばベンゾイル等の $C_{7-15}$ アリールカルボニル等）、スルホン酸由来のアシル基（例えば、メチルスルホニル、エチルスルホニル等の $C_{1-6}$ アルキルスルホニル）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-6}$ アルコキシカルボニル（例えばトリフルオロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリフルオロエトキシカルボニル、トリクロロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリクロロエトキシカルボニル等）等が挙げられるが、「置換基を有していてもよいアミノ基」における「アミノ基」は、置換されていてもよいイミドイル基（例えば、 $C_{1-6}$ アルキルイミドイル、ホルミルイミドイル、アミジノ等）などで置換されていてもよく、また、2個の置換基が窒素原子と一緒になって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノ基としては、例えば1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、4-モルホリニル、1-ピペラジニル及び4位に低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C$

7-10 アラルキル基等)、アリール基(例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等のC<sub>6-10</sub>アリール基等)等を有していてもよい1-ピペラジニル等の3~8員(好ましくは5~6員)の環状アミノ基などが挙げられる。

Xで示される脱離基としては、たとえばハロゲン原子(例、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子など)、アルキルまたはアリールスルホニルオキシ基(例、メタンスルホニルオキシ、トリフルオロメタンスルホニルオキシ、エタンスルホニルオキシ、ベンゼンスルホニルオキシ、p-トルエンスルホニルオキシなど)などが挙げられる。

本発明の式(II)で表わされる化合物の塩としては酸付加塩、例えば無機酸塩(例えば、塩酸塩、硫酸塩、臭化水素酸塩、リン酸塩など)、有機酸塩(例えば、酢酸塩、トリフルオロ酢酸塩、コハク酸塩、マレイン酸塩、フマル酸塩、プロピオン酸塩、クエン酸塩、酒石酸塩、乳酸塩、蔞酸塩、メタンスルホン酸塩、p-トルエンスルホン酸塩など)等のほか、塩基との塩(たとえば、カリウム塩、ナトリウム塩、リチウム塩等のアルカリ金属塩、カルシウム塩、マグネシウム塩等のアルカリ土類金属塩、アンモニウム塩、トリメチルアミン塩、トリエチルアミン塩、tert-ブチルジメチルアミン塩、ジベンジルメチルアミン塩、ベンジルジメチルアミン塩、N,N-ジメチルアニリン塩、ピリジン塩、キノリン塩などの有機塩基との塩)を形成していてもよい。

尚、一般式(II)で表わされる化合物またはその塩は水和物であってもよく、以下、塩、水和物も含め化合物(II)と称する。

#### 【0041】

上記式(II)で表される化合物またはその塩(以下単に化合物(II)という)のなかでもつぎの化合物が好ましい。

(II-1) R<sup>b3</sup>がハロゲン原子、置換基を有していてもよいC<sub>1-4</sub>アルキル基、置換基を有していてもよいC<sub>1-4</sub>アルコキシ基、置換基を有していてもよいアミノ基、ニトロ基またはシアノ基である化合物、

(II-2) R<sup>b1</sup>が置換基を有していてもよい脂環式炭化水素基または置換基を有していてもよいアリール基である化合物、

(II-3) R<sup>b1</sup>が1)置換基を有していてもよい炭化水素基、2)置換基を

有していてもよい複素環基、3) 置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ基、4) 置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルキルチオ基、5) 置換基を有していてもよい  $C_{2-6}$  アルコキシカルボニル基、6) 置換基を有していてもよい  $C_{1-6}$  アルカノイル基、7) 置換基を有していてもよいアミノ基、8) 環状アミノ基、9) ハロゲン原子、10) ニトロ基、11) シアノ基、12) 置換基を有していてもよいカルバモイル基、13) 置換基を有していてもよいスルファモイル基および14) スルホン酸由来のアシル基から選ばれた1~4個の置換基を有していてもよい炭化水素基である化合物、

(II-4)  $R^{b1}$  が1) 置換基を有していてもよい炭化水素基、2) 置換基を有していてもよい複素環基、3) 置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ基、4) 置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルキルチオ基、5) 置換基を有していてもよい  $C_{2-6}$  アルコキシカルボニル基、6) 置換基を有していてもよいアミノ基、7) ハロゲン原子、8) ニトロ基および9) シアノ基から選ばれた1~4個の置換基を有していてもよい炭化水素基である化合物、

(II-5)  $R^{b1}$  が1) 置換基を有していてもよい炭化水素基、2) 置換基を有していてもよい複素環基、3) 置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルキルチオ基、4) 置換基を有していてもよい  $C_{2-6}$  アルコキシカルボニル基、5) 置換基を有していてもよいアミノ基、6) ハロゲン原子および7) ニトロ基から選ばれた1~4個の置換基を有していてもよい炭化水素基である化合物、

(II-6)  $R^{b2}$  が置換基を有していてもよい環状炭化水素基である化合物、

(II-7)  $R^{b3}$  がハロゲン、置換基を有していてもよいカルバモイル基、置換基を有していてもよいスルファモイル基またはスルホン酸由来のアシル基である化合物、

(II-8)  $R^{b3}$  がハロゲンである化合物、

(II-9)  $R^{b4}$  が水素原子である化合物、

(II-10)  $n_b$  が0である化合物、

#### 【0042】

(II-11)  $R^{b1}$  は第1群から選ばれた置換基を有していてもよい第3群から選ばれた炭化水素基を、 $R^{b2}$  は第2群から選ばれた置換基を有していてもよい

い第 1 0 群から選ばれた環状炭化水素基または第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 4 群から選ばれた複素環基を、 $R^{b3}$  はハロゲン原子、カルバモイル基、第 1 1 群から選ばれた 1 個を有していてもよい N-モノ置換カルバモイル基、第 1 1 群から選ばれた 1 個と第 1 4 群から選ばれた 1 個を有していたもよい N, N-ジ置換カルバモイル基、第 1 7 群から選ばれた環状アミノカルボニル基、スルファモイル基、第 1 1 群から選ばれた 1 個を有していてもよい N-モノ置換スルファモイル基、第 1 1 群から選ばれた 1 個と第 1 4 群から選ばれた 1 個を有していたもよい N, N-ジ置換スルファモイル基、第 2 0 群から選ばれた環状アミノスルホニル基、第 1 5 群から選ばれたスルホン酸由来のアシル基、第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルキル基、第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ基、第 8 群から選ばれた置換基を有していてもよい アミノ基、第 9 群から選ばれた環状アミノ基、ニトロ基またはシアノ基である化合物

(上記において、

第 1 群は

1) 第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 3 群から選ばれた炭化水素基、2) 第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい第 4 群から選ばれた複素環基、3) 第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ基、4) 第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{1-4}$  アルキルチオ基、5) 第 2 群から選ばれた置換基を有していてもよい  $C_{2-6}$  アルコキシカルボニル基、6)  $C_{1-6}$  アルカノイル基、7) 第 8 群から選ばれた置換基を有していてもよいアミノ基、8) 第 9 群から選ばれた環状アミノ基、9) ハロゲン原子、10) ニトロ基、11) シアノ基 12) カルバモイル基、13) 第 1 1 群から選ばれた基で置換されたモノ置換カルバモイル基、14) 第 1 1 群から選ばれた 1 個と第 1 4 群から選ばれた 1 個で置換されたジ置換カルバモイル基、15) 第 1 7 群から選ばれた環状アミノカルバモイル基、16) スルファモイル基、17) 第 1 1 群から選ばれた基で置換された N-モノ置換スルファモイル基、18) 第 1 1 群から選ばれた 1 個と第 1 4 群から選ばれた 1 個で置換された N, N-ジ置換スルファモイル基、19) 第 1 9 群から選ばれたスルホン酸由来のアシル基、

## 第2群は

1)  $C_{1-6}$  アルコキシ基、2) ハロゲン原子、3)  $C_{1-6}$  アルキル基、4)  $C_{1-4}$  アルキニル基、5) アミノ基、6) 水酸基、7) シアノ基および8) アミジノ基、

## 第3群は

1)  $C_{1-6}$  アルキル基、2)  $C_{3-8}$  シクロアルキル基および3)  $C_{6-14}$  アリール基、

【0043】

## 第4群は

1) 第5群から選ばれた芳香族単環式複素環基、2) 第6群から選ばれた芳香族縮合複素環基および3) 第7群から選ばれた飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基、

## 第5群は

フリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリアゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニルおよびトリアジニル、

## 第6群は

ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾピラニル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、ブリニル、ブテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔

1,5-a] ピリジル、イミダゾ [1,2-a] ピリジル、イミダゾ [1,5-a] ピリジル、イミダゾ [1,2-b] ピリダジニル、イミダゾ [1,2-a] ピリミジニル、1,2,4-トリアゾロ [4,3-a] ピリジルおよび1,2,4-トリアゾロ [4,3-b] ピリダジニル、

第7群は

オキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニルおよびピペラジニル、

第8群は

1)  $C_{1-6}$  アルキル、2)  $C_{1-6}$  アルカノイル、3)  $C_{7-13}$  アリールカルボニル、4) ハロゲン化されていてもよい  $C_{2-6}$  アルコキシカルボニル、5)  $C_{1-6}$  アルキルイミドイル、6) ホルミルイミドイルおよび7) アミノ、  
【0044】

第9群は

1) 1-アゼチジニル、2) 1-ピロリジニル、3) 1-ピペリジニル、4) 4-モルホリニル、5) 1-ピペラジニルおよび6) 4位に  $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{7-10}$  アラルキルまたは  $C_{6-10}$  アリールを有していてもよい 1-ピペラジニル、

第10群は

$C_{3-9}$  シクロアルキル、1-インダニル、2-インダニル、 $C_{3-6}$  シクロアルケニル、 $C_{4-6}$  シクロアルカンジエニルおよび  $C_{6-14}$  アリール、

第11群は

1) 第12群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルキル基、2) 第12群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{3-6}$  シクロアルキル基、3) 第12群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{6-10}$  アリール基、4) 第12群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{7-10}$  アラルキル基、5) 第12群から選ばれた基で置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシ基および6) 第12群から選ばれた基で置換されていてもよい第13群から選ばれた複素環基、

## 第12群は

1) 水酸基、2) アミノ基、3) 第16群から選ばれた基でモノまたはジ置換されたアミノ基、4) ハロゲン原子、5) ニトロ基、6) シアノ基、7) ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_{1-6}$ アルキル基および8) ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_{1-6}$ アルコキシ基、

## 第13群は

環系を構成する原子（環原子）として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種を少なくとも1個含む1) 第5群および第6群から選ばれた芳香族複素環基および2) 第7群から選ばれた飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基、

## 第14群は

$C_{1-6}$ アルキル基、 $C_{3-6}$ シクロアルキル基および $C_{7-10}$ アラルキル基、

## 第15群は

1) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{1-10}$ アルキルスルホニル、2) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{2-6}$ アルケニルスルホニル、3) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{2-6}$ アルキニルスルホニル、4) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{3-9}$ シクロアルキルスルホニル、5) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{3-9}$ シクロアルケニルスルホニル、6) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{6-14}$ アリールスルホニルおよび7) 第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{7-10}$ アラルキルスルホニル、

【0045】

## 第16群は

$C_{1-6}$ アルキル基、 $C_{1-6}$ アルカノイル、 $C_{7-13}$ アリールカルボニルおよび $C_{1-6}$ アルキルスルホニル、

## 第17群は

1-アゼチジニルカルボニル、1-ピロリジニルカルボニル、1-ピペリジニルカルボニル、4-モルホリニルカルボニルおよび第18群から選ばれた基で置換

されていてもよい1-ピペラジニルカルボニル、

第18群は

$C_{1-6}$ アルキル基、 $C_{7-10}$ アラルキル基および $C_{6-10}$ アリール基、

第19群は

第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{1-10}$ アルキルスルホニル、

第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{2-6}$ アルケニルスルホニル

、第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{2-6}$ アルキニルスルホニル、

第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{3-9}$ シクロアルキルスル

ホニル、第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{3-9}$ シクロアルケニ

ルスルホニル、第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{6-14}$ アリー

ルスルホニルおよび第12群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{7-10}$

アラルキルスルホニル、

第20群は

1-アゼチジニルスルホニル、1-ピロリジニルスルホニル、1-ピペリジニル

スルホニル、4-モルホリニルスルホニルおよび第18群から選ばれた基で置換

されていてもよい1-ピペラジニルスルホニル、

をそれぞれ示す。)、

(II-12)  $R^{b1}$  が第1群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{3-8}$

シクロアルキル基または第1群から選ばれた置換基を有していてもよい $C_{6-1}$

$C_4$ アリール基である化合物、

(II-13)  $R^{b1}$  が1) 置換基としてハロゲン原子、ハロゲンで置換されて

いてもよい $C_{1-6}$ アルキル、 $C_{1-4}$ アルキルチオ、ニトロ、カルバモイル、

スルファモイルまたは $C_{1-6}$ アルキルスルホニルを有していてもよい $C_{6-1}$

$C_4$ アリール基、2) 置換基として① $C_{2-6}$ アルコキシカルボニル基または②置

換基として $C_{1-6}$ アルキルを有していてもよいフェニルを有していてもよい $C$

$1-6$ アルキル基または3) 置換基として①ハロゲン原子、②ハロゲンで置換さ

れていてもよい $C_{1-6}$ アルキルまたは③ハロゲンで置換されていてもよい $C_1$

$-6$ アルコキシ基を有していてもよい $C_{3-8}$ シクロアルキル基、 $R^{b2}$  が置換

基としてハロゲン原子、 $C_{1-6}$ アルキル、 $C_{1-4}$ アルコキシ、またはシアノ



を有していてもよいフェニル基、 $C_3-8$ シクロアルキル基またはピリジル基、 $R^{b3}$ が①ハロゲン原子、②カルバモイル基、③N原子上に $C_1-6$ アルキルおよび $C_3-6$ シクロアルキルの1または2個を有していてもよいスルファモイル基、第20群から選ばれた環状アミノスルホニル基、 $C_1-6$ アルキルスルホニル基または $C_3-6$ シクロアルキルスルホニル基、 $R^{b4}$ が水素原子、 $n_b$ が0または1、 $p_b$ が0または1である上記(II-12)記載の化合物、

(II-14)  $R^{b1}$ が1)置換基としてハロゲン原子、 $C_1-3$ アルキル、トリフルオロメチル、メトキシ、トリフルオロメトキシ、メチルチオまたはニトロを有していてもよいフェニル、2)ナフチル、3)置換基として① $C_2-3$ アルコキシカルボニル、②フェニルまたは③3-イロプロペニルフェニルを有していてもよい $C_1-6$ アルキル基または4)シクロヘキシル基、 $R^{b2}$ が置換基としてハロゲン原子、メチル、メトキシまたはシアノを有していてもよいフェニル基、シクロヘキシル基または3-ピリジル基、 $R^{b3}$ が①ハロゲン原子、②カルバモイル基、③4-モルホリニルスルホニル基または④メチルスルホニル基、 $R^{b4}$ が水素原子、 $n_b$ が0または1、 $p_b$ が0または1である上記(II-12)記載の化合物、

(II-15)  $R^{b1}$ が置換基としてハロゲン原子または $C_1-3$ アルキルを有していてもよいフェニル基、 $R^{b2}$ が置換基としてハロゲン原子またはメチルを有していてもよいフェニル基、 $R^{b3}$ が①ハロゲン原子、②カルバモイル基、③N原子上に $C_1-6$ アルキルおよび $C_3-6$ シクロアルキルの1または2個を有していてもよいスルファモイル基、第20群から選ばれた環状アミノスルホニル基、 $C_1-6$ アルキルスルホニル基または $C_3-6$ シクロアルキルスルホニル基、 $R^{b4}$ が水素原子、 $n_b$ が0、 $p_b$ が0または1である上記(II-12)記載の化合物、

が好ましい。

#### 【0046】

$R^{c1}$ で示される炭化水素基としては、例えば脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリアル基等が挙げられる。好ましくは脂肪族鎖式炭化水素基または脂環式炭化水素基である。

該脂肪族鎖式炭化水素基としては、例えばアルキル基、アルケニル基、アルキニル基等の直鎖状又は分枝鎖状の脂肪族炭化水素基が挙げられる。好ましくはアルキル基である。該アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、1-メチルプロピル、*n*-ヘキシル、イソヘキシル、1,1-ジメチルブチル、2,2-ジメチルブチル、3,3-ジメチルブチル、3,3-ジメチルプロピル、2-エチルブチル、*n*-ヘプチル、1-メチルヘプチル、1-エチルヘキシル、*n*-オクチル、1-メチルヘプチル、ノニル等の  $C_{1-10}$  アルキル基（好ましくは  $C_{1-6}$  アルキル等）等が挙げられる。該アルケニル基としては、例えばビニル、アリル、イソプロペニル、2-メチルアリル、1-プロペニル、2-メチル-1-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-エチル-1-ブテニル、2-メチル-2-ブテニル、3-メチル-2-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、4-メチル-3-ペンテニル、1-ヘキセニル、2-ヘキセニル、3-ヘキセニル、4-ヘキセニル、5-ヘキセニル等の  $C_{2-6}$  アルケニル基等が挙げられる。該アルキニル基としては、例えばエチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ブチニル、3-ブチニル、1-ペンチニル、2-ペンチニル、3-ペンチニル、4-ペンチニル、1-ヘキシニル、2-ヘキシニル、3-ヘキシニル、4-ヘキシニル、5-ヘキシニル等の  $C_{2-6}$  アルキニル基が挙げられる。

該脂環式炭化水素基としては、例えばシクロアルキル基、シクロアルケニル基、シクロアルカンジエニル基等の飽和又は不飽和の脂環式炭化水素基が挙げられる。好ましくはシクロアルキル基である。該シクロアルキル基としては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル等の  $C_{3-9}$  シクロアルキル（好ましくは  $C_{3-8}$  シクロアルキル等）等、また1-インダニル、2-インダニルなどの縮合環が挙げられる。該シクロアルケニル基としては、例えば2-シクロペンテン-1-イル、3-シクロペンテン-1-イル、2-シクロヘキセン-1-イル、3-シクロヘキセン-1-イル、1-シクロブテン-1-イル、1-シクロペン

テン-1-イル等の  $C_{3-6}$  シクロアルケニル基等が挙げられる。該シクロアルカンジエニル基としては、例えば 2,4-シクロペンタンジエン-1-イル、2,4-シクロヘキサジエン-1-イル、2,5-シクロヘキサジエン-1-イル等の  $C_{4-6}$  シクロアルカンジエニル基等が挙げられる。

該アリール基としては、単環式又は縮合多環式芳香族炭化水素基が挙げられ、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル、4-インダニル、5-インダニル等の  $C_{6-14}$  アリール基等が好ましく、中でもフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が特に好ましい。

#### 【0047】

$R^{C2}$  で示される炭素数 2 以上の炭化水素基としては、 $R^{C1}$  で示される炭化水素基のうち炭素数 2 以上のものが挙げられる。好ましくは  $R^{C1}$  で述べたもののうち、 $C_{2-6}$  アルキルおよび  $C_{3-8}$  シクロアルキルである。

$R^{C1}$  と  $R^{C2}$  が結合して隣接する窒素原子と共に置換基を有していてもよい環を形成する場合、このような環としては、1 個の窒素原子の他にさらに窒素原子、酸素原子、イオウ原子を含む環であってもよく、その例としてはたとえば、1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、1-ホモピペリジニル、ヘプタメチレンイミノ、1-ピペラジニル、1-ホモピペラジニル、モルホリノ、チオモルホリノなどの単環、2-イソインドリニル、1,2,3,4-テトラヒドロ-2-イソキノリル、1,2,4,5-テトラヒドロ-3H-3-ベンゾアゼピン-3-イルなどの縮合環、インデン-1-スピロ-4'-ピペリジン-1'-イルなどのスピロ環などの環状アミノ基が挙げられ、該環状アミノ基は該環上の化学的に可能な位置に 1~5 個、好ましくは 1~3 個の置換基を有していてもよい。

該置換基としては、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、オキソ基、ハロゲン原子（例、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等）、および一般式： $-Y^C R^{Ca}$ （式中、 $R^{Ca}$  は置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を、 $Y^C$  は結合手（単結合）、 $-CR^{Cb}R^{Cc}$ 、 $-COO-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-NR^{Cb}$ 、 $-CS-NR^{Cb}$ 、 $-CO-S-$ 、 $-CS-S-$ 、 $-CO-NR^{Cb}-CO-NR^{Cc}$ 、 $-C(=NH)-NR^{Cb}$ 、 $-NR^{Cb}$ 、 $-NR^{Cb}-C$

$\text{O-}$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CS-}$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CO}-\text{NR}^{\text{cc}}-$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CS}-\text{NR}^{\text{cc}}-$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CO}-\text{O-}$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CS}-\text{O-}$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CO}-\text{S-}$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{CS}-\text{S-}$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{C}(=\text{NH})-\text{NR}^{\text{cc}}-$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{SO}_2-$ 、 $-\text{NR}^{\text{cb}}-\text{NR}^{\text{cc}}-$ 、 $-\text{O-}$ 、 $-\text{O}-\text{CO-}$ 、 $-\text{O}-\text{CS-}$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-\text{O-}$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-\text{NR}^{\text{cb}}-$ 、 $-\text{O}-\text{C}(=\text{NH})-\text{NR}^{\text{cb}}-$ 、 $-\text{S-}$ 、 $-\text{SO-}$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、 $-\text{SO}_2-\text{NR}^{\text{cb}}-$ 、 $-\text{S}-\text{CO-}$ 、 $-\text{S}-\text{CS-}$ 、 $-\text{S}-\text{CO}-\text{NR}^{\text{cb}}-$ 、 $-\text{S}-\text{CS}-\text{NR}^{\text{cb}}-$ 、 $-\text{S}-\text{C}(=\text{NH})-\text{NR}^{\text{cb}}-$ などを示し、 $\text{R}^{\text{cb}}$ 、 $\text{R}^{\text{cc}}$ は水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアルケニル基、置換基を有していてもよいアルキニル基、置換基を有していてもよいアリール基、置換基を有していてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、置換基を有していてもよい複素環基、カルボン酸由来のアシル基、置換基を有していてもよいアルキルスルホニル基、置換基を有していてもよいアリールスルホニル基等を示す)で表される基などが挙げられる。 $\text{R}^{\text{ca}}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基の「炭化水素基」としては、例えば脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基等が挙げられる。これらの脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基としては $\text{R}^{\text{c1}}$ で示される脂肪族鎖式炭化水素基、脂環式炭化水素基及びアリール基として述べたものがそれぞれ挙げられる。また該炭化水素基の置換基としては、後述の $\text{R}^{\text{c3}}$ で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における置換基として述べたものが挙げられる。

## 【0048】

前記 $\text{R}^{\text{ca}}$ で示される「置換基を有していてもよい複素環基」としては、後述の $\text{R}^{\text{c3}}$ で示される「置換基を有していてもよい複素環基」と同様なものが挙げられる。

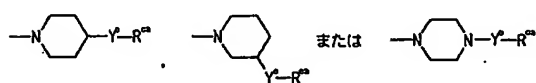
前記 $\text{R}^{\text{cb}}$ および $\text{R}^{\text{cc}}$ で示される置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアルケニル基、置換基を有していてもよいアルキニル基、置換基を有していてもよいアリール基、置換基を有していてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、置換基を有していてもよい複素環基、カルボン酸由来のアシル基、置換基を有していてもよいアルキルスルホニル基、置換基を有していてもよいアリールスルホニル基としては後述の $\text{R}^{\text{c3}}$ で示される置

換基を有していてもよい炭化水素基における置換基としてのべたものが挙げられる。

$R^{C1}$  および  $R^{C2}$  としては、両者が結合して窒素原子と共に置換基を有していてもよい複素環を形成しているのが好ましい。

さらに好ましくは、 $NR^{C1}R^{C2}$  が式：

【化 2 1】



(式中、 $Y^C$  および  $R^{Ca}$  は前記と同意義である) で示される基のときである。ここで、 $Y^C$  と  $R^{Ca}$  は前記と同意義を示すが、 $R^{Ca}$  は特に置換基を有していてもよいアリール基または置換基を有していてもよい複素環基が好ましい。

$Y^C R^{Ca}$  としては置換基を有していてもよいベンジル基が特に好ましい。

また  $NR^{C1}R^{C2}$  としては置換基を有していてもよい4-ベンジル-1-ピペリジニル基が特に好ましい。

$R^{C3}$  で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における炭化水素基としては  $R^{C1}$  で示される炭化水素基と同様なものが挙げられ、なかでも  $C_{1-6}$  アルキル基、 $C_{3-8}$  シクロアルキル基、アリール基が好ましい。これらの例も  $R^{C1}$  で述べたものが挙げられる。

$R^{C3}$  で示される置換基を有していてもよい複素環基における複素環基としては、例えば、環系を構成する原子(環原子)として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種(好ましくは1ないし2種)を少なくとも1個(好ましくは1ないし4個、さらに好ましくは1ないし2個)含む芳香族複素環基、飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基(脂肪族複素環基)等が挙げられる。

該芳香族複素環基としては、芳香族単環式複素環基(例えばフリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリア

ゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、トリアジニル等の5ないし6員の芳香族単環式複素環基)及び芳香族縮合複素環基〔例えばベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾピラニル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、ブテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-b〕ピリダジニル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリミジニル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-a〕ピリジル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-b〕ピリダジニル等の8~12員の芳香族縮合複素環基(好ましくは、前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基がベンゼン環と縮合した複素環または前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基の同一または異なった複素環2個が縮合した複素環)〕などが挙げられる。

## 【0049】

該非芳香族複素環基としては、例えばオキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、ピペラジニル等の3~8員(好ましくは5~6員)の飽和あるいは不飽和(好ましくは飽和)の非芳香族複素環基(脂肪族複素環基)などが挙げられる。

$R^{C3}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における置換基および  $R^{C3}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基における置換基としては、例えば置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアルケニル基、置換基を有していてもよいアルキニル基、置換基を有していてもよいア

リール基、置換基を有していてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、置換基を有していてもよい複素環基、置換基を有していてもよいアミノ基、置換基を有していてもよいイミドイル基、置換基を有していてもよいアミジノ基、置換基を有していてもよい水酸基、置換基を有していてもよいチオール基、エステル化されていてもよいカルボキシル基、置換基を有していてもよいカルバモイル基、置換基を有していてもよいチオカルバモイル基、置換基を有していてもよいスルファモイル基、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等、好ましくは塩素、臭素等）、シアノ基、ニトロ基、カルボン酸由来のアシル基、置換基を有していてもよいアルキルスルフィニル基、置換基を有していてもよいアルキルスルホニル基、置換基を有していてもよいアリールスルフィニル基、置換基を有していてもよいアリールスルホニル基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に 1 ないし 5 個（好ましくは 1 ないし 3 個）置換していてもよい。

置換基としての「置換基を有していてもよいアリール基」におけるアリール基としては、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル等の  $C_{6-14}$  アリール基等が挙げられる。ここで、アリール基の置換基としては、低級アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ等の  $C_{1-6}$  アルコキシ基等）、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等の  $C_{1-6}$  アルキル基等）、アミノ基、水酸基、シアノ基、アミジノ基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に 1 又は 2 個置換していてもよい。

置換基としての「置換基を有していてもよいシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基としては、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル等の  $C_{3-7}$  シクロアルキル基等が挙げられる。ここで、シクロアルキル基の置換基としては、前記した「置換基を有していてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいシクロアルケニル基」におけるシクロアルケニル基としては、例えばシクロプロペニル、シクロブテニル、シクロペンテニル、シクロヘキセニル等の  $C_{3-6}$  シクロアルケニル基等が挙げられる。

。ここで、置換基を有していてもよいシクロアルケニル基の置換基としては、前記した「置換基を有していてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

## 【0050】

置換基としての「置換基を有していてもよいアルキル基」におけるアルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、1-メチルプロピル、*n*-ヘキシル、イソヘキシル、1,1-ジメチルブチル、2,2-ジメチルブチル、3,3-ジメチルブチル、3,3-ジメチルプロピル等の $C_{1-6}$ アルキル等が挙げられる。ここで、アルキル基の置換基としては、前記した「置換基を有していてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいアルケニル基」におけるアルケニル基としては、例えばビニル、アリル、イソプロペニル、2-メチルアリル、1-プロペニル、2-メチル-1-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-エチル-1-ブテニル、2-メチル-2-ブテニル、3-メチル-2-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、4-メチル-3-ペンテニル、1-ヘキセニル、2-ヘキセニル、3-ヘキセニル、4-ヘキセニル、5-ヘキセニル等の $C_{2-6}$ アルケニル基等が挙げられる。ここで、アルケニル基の置換基としては、前記した「置換基を有していてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいアルキニル基」におけるアルキニル基としては、例えばエチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ブチニル、3-ブチニル、1-ペンチニル、2-ペンチニル、3-ペンチニル、4-ペンチニル、1-ヘキシニル、2-ヘキシニル、3-ヘキシニル、4-ヘキシニル、5-ヘキシニル等の $C_{2-6}$ アルキニル基が挙げられる。ここで、アルキニル基の置換基としては、前記した「置換基を有していてもよいアリール基」における置換基と同様な数の同様なものが挙げられる。



置換基としての「置換基を有していてもよい複素環基」における複素環基としては、環系を構成する原子（環原子）として、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種（好ましくは1ないし2種）を少なくとも1個（好ましくは1ないし4個、さらに好ましくは1ないし2個）含む芳香族複素環基、飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）等が挙げられる。

「芳香族複素環基」としては、芳香族単環式複素環基（例えばフリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、フラザニル、1,2,3-チアジアゾリル、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,3-トリアゾリル、1,2,4-トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、トリアジニル等の5ないし6員の芳香族単環式複素環基）及び芳香族縮合複素環基〔例えばベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、1H-インダゾリル、ベンズインダゾリル、ベンゾオキサゾリル、1,2-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、1,2-ベンゾイソチアゾリル、1H-ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、 $\alpha$ -カルボリニル、 $\beta$ -カルボリニル、 $\gamma$ -カルボリニル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、フェナトリジニル、フェナトロリニル、インドリジニル、ピロロ〔1,2-b〕ピリダジニル、ピラゾロ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,5-a〕ピリジル、イミダゾ〔1,2-b〕ピリダジニル、イミダゾ〔1,2-a〕ピリミジニル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-a〕ピリジル、1,2,4-トリアゾロ〔4,3-b〕ピリダジニル等の8～12員の芳香族縮合複素環基（好ましくは、前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基がベンゼン環と縮合した複素環または前記した5ないし6員の芳香族単環式複素環基の同一または異なった複素環2個が縮合した複素環）〕などが挙げられる。

## 【0051】

「非芳香族複素環基」としては、例えばオキシラニル、アゼチジニル、オキセタニル、チエタニル、ピロリジニル、テトラヒドロフリル、チオラニル、ピペリジニル、テトラヒドロピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、ピペラジニル等の3～8員（好ましくは5～6員）の飽和あるいは不飽和（好ましくは飽和）の非芳香族複素環基（脂肪族複素環基）などが挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよい複素環基」が有していてもよい置換基としては、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル、ベンゾイル等）等が挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいアミノ基」、「置換基を有していてもよいイミドイル基」、「置換基を有していてもよいアミジノ基」、「置換基を有していてもよい水酸基」及び「置換基を有していてもよいチオール基」における置換基としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アシル基（例えば $C_{1-6}$ アルカノイル（例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等）、ベンゾイル等）、 $C_{1-6}$ アルキルスルホニル（例えばメタンスルホニル、エタンスルホニル等）、 $C_{3-14}$ アリールスルホニル（例えばベンゼンスルホニル、*p*-トルエンスルホニル等）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-6}$ アルコキシカルボニル（例えばトリフルオロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリフルオロエトキシカルボニル、トリクロロメトキシカルボニル、2, 2, 2-トリクロロエトキシカルボニル等）等が挙げられるが、置換基としての「置換基を有していてもよいアミノ基」における「アミノ基」は、置換基を有していてもよいイミドイル基（例えば、 $C_{1-6}$ アルキルイミドイル、ホルミルイミドイル、アミジノ等）などで置換されていてもよく、また、2個の置換基が窒素原子と一緒になって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノ基としては、例えば1-アゼチジニル、1-ピロリジニル、1-ピペリジニル、モルホリノ、1-ピペラジニル及び4位に低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチ

ル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等のC<sub>1-6</sub>アルキル基等)、アラルキル基(例えばベンジル、フェネチル等のC<sub>7-10</sub>アラルキル基等)、アリール基(例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等のC<sub>6-10</sub>アリール基等)等を有していてもよい1-ピペラジニル等の3~8員(好ましくは5~6員)の環状アミノなどが挙げられる。

「置換基を有していてもよいカルバモイル基」としては、無置換のカルバモイルの他、N-モノ置換カルバモイル基及びN,N-ジ置換カルバモイル基が挙げられる。

#### 【0052】

「N-モノ置換カルバモイル基」は窒素原子上に1個の置換基を有するカルバモイル基を意味し、該置換基としては、例えば低級アルキル基(例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等のC<sub>1-6</sub>アルキル基等)、シクロアルキル基(例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等のC<sub>3-6</sub>シクロアルキル基等)、アリール基(例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等のC<sub>6-10</sub>アリール基等)、アラルキル基(例えばベンジル、フェネチル等のC<sub>7-10</sub>アラルキル基、好ましくはフェニル-C<sub>1-4</sub>アルキル基等)、複素環基(例えば前記したR<sup>C3</sup>で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における置換基としての「複素環基」と同様のもの等)等が挙げられる。該低級アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基、複素環基は置換基を有していてもよく、その置換基としては、例えば水酸基、置換基を有していてもよいアミノ基[該アミノ基は、例えば低級アルキル基(例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等のC<sub>1-6</sub>アルキル基等)、アシル基(例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等のC<sub>1-6</sub>アルカノイル、ベンゾイル等)等の1又は2個を置換基として有していてもよい。]、ハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)、ニトロ基、シアノ基、1ないし5個のハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)で置換基を有していてもよい低級アルキル基、1ないし5個のハロゲン原子(例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等)で置換基を

有していてもよい低級アルコキシ基等が挙げられる。該低級アルキル基としては、例えばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等が挙げられ、特にメチル、エチル等が好ましい。該低級アルコキシ基としては、例えばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等が挙げられ、特にメトキシ、エトキシ等が好ましい。また、これらの置換基は、同一又は異なって1又は2ないし3個（好ましくは1又は2個）置換しているのが好ましい。

「N,N-ジ置換カルバモイル基」は、窒素原子上に2個の置換基を有するカルバモイル基を意味し、該置換基の一方の例としては上記した「N-モノ置換カルバモイル基」における置換基と同様のものが挙げられ、他方の例としては、例えば低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、 $C_{3-6}$ シクロアルキル基（例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等）、 $C_{7-10}$ アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等、好ましくはフェニル- $C_{1-4}$ アルキル基等）等が挙げられる。また、2個の置換基が窒素原子と一緒にあって環状アミノ基を形成する場合もあり、この様な場合の環状アミノカルバモイル基としては、例えば1-アゼチジニルカルボニル、1-ピロリジニルカルボニル、1-ピペリジニルカルボニル、モルホリノカルボニル、1-ピペラジニルカルボニル及び4位に低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アラルキル基（例えばベンジル、フェネチル等の $C_{7-10}$ アラルキル基等）、アリール基（例えばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等の $C_{6-10}$ アリール基等）等を有していてもよい1-ピペラジニルカルボニル等の3～8員（好ましくは5～6員）の環状アミノ-カルボニルなどが挙げられる。

#### 【0053】

「置換基を有していてもよいチオカルバモイル基」の置換基としては、前記し

た「置換基を有していてもよいカルバモイル基」の置換基と同様のものが挙げられる。

「置換基を有していてもよいスルファモイル基」としては、無置換のスルファモイルの他、N-モノ置換スルファモイル基及びN,N-ジ置換スルファモイル基が挙げられる。

「N-モノ置換スルファモイル基」は窒素原子上に1個の置換基を有するスルファモイル基を意味し、該置換基としては、N-モノ置換カルバモイル基の置換基と同様のものが挙げられる。

「N,N-ジ置換スルファモイル基」は、窒素原子上に2個の置換基を有するスルファモイル基を意味し、該置換基としては、N,N-ジ置換カルバモイル基の置換基と同様のものが挙げられる。

「エステル化されていてもよいカルボキシル基」としては遊離のカルボキシル基の他、例えば低級アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アラキルオキシカルボニル基等が挙げられる。

「低級アルコキシカルボニル基」としては、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、イソプロポキシカルボニル、ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニル、sec-ブトキシカルボニル、tert-ブトキシカルボニル、ペンチルオキシカルボニル、イソペンチルオキシカルボニル、ネオペンチルオキシカルボニル等のC<sub>1</sub>-6アルコキシカルボニル基等が挙げられ、中でもメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル等のC<sub>1</sub>-3アルコキシカルボニル基等が好ましい。

「アリールオキシカルボニル基」としては、例えばフェノキシカルボニル、1-ナフトキシカルボニル、2-ナフトキシカルボニル等のC<sub>7</sub>-12アリールオキシカルボニル基等が好ましい。

「アラキルオキシカルボニル基」としては、例えばベンジルオキシカルボニル、フェネチルオキシカルボニル等のC<sub>7</sub>-10アラキルオキシカルボニル基等（好ましくは、C<sub>6</sub>-10アリール-C<sub>1</sub>-4アルコキシカルボニルなど）が好ましい。

該「アリールオキシカルボニル基」、「アラキルオキシカルボニル基」は置

換基を有していてもよく、その置換基としては、前記したN-モノ置換カルバモイル基の置換基の例としてのアリール基、アラルキル基の置換基として挙げたものと同様のものが同様な数用いられる。

置換基としての「カルボン酸由来のアシル基」としては、水素原子又は前記した「N-モノ置換カルバモイル基」が窒素原子上に1個有する置換基とカルボニルとが結合したものなどが挙げられるが、好ましくは、ホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル等の $C_{1-6}$ アルカノイル、ベンゾイル等のアシルが挙げられる。

置換基としての「置換基を有していてもよいアルキルスルフィニル基」及び「置換基を有していてもよいアルキルスルホニル基」におけるアルキルとしては、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、t-ブチル、ペンチル、ヘキシル等の $C_{1-6}$ アルキル基等の低級アルキル基が挙げられる。

#### 【0054】

置換基としての「置換基を有していてもよいアリールスルフィニル基」及び「置換基を有していてもよいアリールスルホニル基」におけるアリールとしては、例えばフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、アセナフチレニル等の $C_{6-14}$ アリール基等が挙げられる。

これらのアルキル、アリールの置換基としては、低級アルコキシ基（例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ等の $C_{1-6}$ アルコキシ基等）、ハロゲン原子（例えばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素等）、低級アルキル基（例えばメチル、エチル、プロピル等の $C_{1-6}$ アルキル基等）、アミノ基、水酸基、シアノ基、アミジノ基等が挙げられ、これらの任意の置換基は置換可能な位置に1又は2個置換していてもよい。

$R^{C4}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基は $R^{C3}$ で示される置換基を有していてもよい炭化水素基と同様なものが挙げられ、また $R^{C4}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基は $R^{C3}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基と同様なものが挙げられる。

$E^C$ で示されるオキソ基以外の置換基を有していてもよい2価の鎖状炭化水素

基における2価の鎖状炭化水素基としては例えば、メチレン、エチレン等の $C_1 - 6$ アルキレン、エテニレン等の $C_2 - 6$ アルケニレン、エチニレン等の $C_2 - 6$ アルキニレン等が挙げられる。好ましいものは $C_1 - 5$ アルキレンであり、もっとも好ましいものはトリメチレンである。

該2価の炭化水素基の置換基は、オキシ基以外のものであればよく、その具体例としては、たとえば、置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、置換基を有していてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、エステル化されていてもよいカルボキシ基、置換基を有していてもよいカルバモイル基もしくはチオカルバモイル基、置換基を有していてもよいアミノ基、置換基を有していてもよい水酸基、置換基を有していてもよいチオール（メルカプト）基、カルボン酸由来のアシル基、置換基を有していてもよいアルキルスルホニル基、置換基を有していてもよいアリールスルホニル基、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素など）、ニトロ、シアノなどが挙げられる。置換基の数が1～3であってもよい。これらの置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、置換基を有していてもよいシクロアルキル基もしくはシクロアルケニル基、エステル化基を有していてもよいカルボキシ基、置換基を有していてもよいカルバモイル基もしくはチオカルバモイル基、置換基を有していてもよいアミノ基、置換基を有していてもよい水酸基、置換基を有していてもよいチオール（メルカプト）基、カルボン酸由来のアシル基、置換基を有していてもよいアルキルスルホニル基、置換基を有していてもよいアリールスルホニル基は、前記 $R^{C3}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基における置換基として述べたものと同様なものが挙げられる。

$J^C$ で示される置換基を有していてもよいメチン基における置換基としては前記 $R^{C3}$ で示される置換基を有していてもよい複素環基における置換基として述べたものと同様なものが挙げられる。

#### 【0055】

$Q^C$ および $R^C$ で示される置換基を有していてもよい2価の $C_1 - 3$ 鎖状炭化水素基における2価の $C_1 - 3$ 鎖状炭化水素基としては、 $E^C$ で示されるオキシ基以外の置換基を有していてもよい2価の鎖状炭化水素基における2価の鎖状炭

化水素基のうち、炭素数 1～3 のものが挙げられる。

$Q^C$  および  $R^C$  で示される置換基を有していてもよい 2 価の  $C_{1-3}$  鎖状炭化水素基における置換基としては、 $E^C$  で示されるオキソ基以外の置換基を有していてもよい 2 価の鎖状炭化水素基における置換基と同様なものが挙げられる。

$R^{C5}$  で示されるカルボキシ基またはスルホン酸基の塩としては、たとえばナトリウム、カリウム、リチウムなどのアルカリ金属との塩、たとえばカルシウム、マグネシウム、ストロンチウムなどのアルカリ土類金属との塩の他、アンモニウム塩などが挙げられる。

式 (III) で表される化合物またはその塩（以下単に化合物 (III) という）のなかでも次の化合物が好ましい。

(III-1)  $R^{C1}$  が  $C_{1-6}$  アルキル基または  $C_{3-8}$  シクロアルキル基で  $R^{C2}$  が  $C_{2-6}$  アルキル基または  $C_{3-8}$  シクロアルキル基であるか、または  $R^{C1}$  と  $R^{C2}$  が結合して隣接する窒素原子と共に置換基を有していてもよい環を形成しており、 $R^{C3}$  が置換基を有していてもよい  $C_{1-6}$  アルキル基、置換基を有していてもよい  $C_{3-8}$  シクロアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基または置換基を有していてもよい複素環基で、 $R^{C4}$  が水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよい  $C_{3-8}$  シクロアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基または置換基を有していてもよい複素環基で、 $E^C$  がオキソ基以外の置換基を有していてもよい  $C_{2-5}$  アルキレン基で、 $G^C$  が  $CO$  または  $SO_2$  で、 $J^C$  が窒素原子または置換基を有していてもよいメチン基で、 $Q^C$  および  $R^C$  がそれぞれ結合手または置換基を有していてもよい  $C_{1-3}$  アルキレン基である化合物、

(III-2)  $R^{C1}$  と  $R^{C2}$  が結合して隣接する窒素原子と共に置換基を有していてもよい環を形成している化合物、

(III-3) 置換基を有していてもよい環がそれぞれ置換基を有していてもよい 1-ピペリジニル基または 1-ピペラジニル基である上記 (III-2) 記載の化合物、

(III-4) 1-ピペリジニル基または 1-ピペラジニル基の置換基が (1) ベンゼン環にハロゲンを含めて置換基を有していてもよいフェニル- $C_{1-4}$  アルキル、(2) ヒ



ドロキシを有していてもよいジフェニルメチル、(3) ベンゼン環にハロゲンを有していてもよいベンゾイル、(4) 2-フェニルエテン-1-イル、(5) ハロゲンを有していてもよいフェニル、(6) ヒドロキシ、(7) フェノキシまたは(8) ベンジルオキシである上記(III-3)記載の化合物、

(III-5) 置換基を有していてもよい環が置換基を有していてもよい1-ピペリジニル基である上記(III-2)記載の化合物、

(III-6) 1-ピペリジニル基の置換基がベンゼン環にハロゲンを有していてもよいベンジル基である上記(III-5)記載の化合物、

(III-7)  $R^{C3}$  が(1)  $C_{1-6}$  アルキル基、(2)  $C_{3-8}$  シクロアルキル基、(3) ヒドロキシ基を有していてもよいベンジル基、(4) ナフチルメチル基、(5) 置換基として①ハロゲンを有していてもよい $C_{1-4}$  アルキル、②ハロゲンを有していてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ、③フェニル、④シアノ、⑤ベンジルオキシまたは⑥ハロゲン原子を有していてもよいフェニル基、(6) ナフチル基、(7) インダニル基または(8) テトラヒドロナフチル基である化合物、

(III-8)  $R^{C3}$  が置換基として $C_{1-4}$  アルキルもしくはハロゲンを有していてもよいフェニル基である化合物、

(III-9)  $E^C$  がヒドロキシを有していてもよい $C_{2-6}$  ポリメチレンである化合物、

(III-10)  $R^{C4}$  が(1) 水素原子、(2) ①ハロゲン、②ピリジル、③モルホリノ、④フリル、⑤エチニルまたは⑥ $C_{3-8}$  シクロアルキルを有していてもよい $C_{1-6}$  アルキル、(3) ベンゼン環に①ハロゲン、② $C_{1-4}$  アルキル、③ハロゲン- $C_{1-4}$  アルキルまたは④ $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよいフェニル- $C_{1-4}$  アルキルまたは(4)  $C_{3-8}$  シクロアルキルである化合物、

(III-11)  $R^{C4}$  が①置換基としてハロゲンまたはフリルを有していてもよい $C_{1-4}$  アルキル基または②ベンゼン環にハロゲンを有していてもよいベンジル基である化合物、

(III-12)  $-N(R^{C1})R^{C2}$  が置換基を有していてもよい1-ピペリジ

ニル基、 $E^C$  がトリメチレン基、 $R^C$  が置換基を有していてもよいフェニル基、 $G^C$  がCO、 $J^C$  がCHで、かつ $Q^C$  および $R^C$  がそれぞれメチレン基である化合物、

が好ましい。

# 【0056】

上記式中、 $B^d$  で表される $-NR^{da}-SO_2-$  および $-NR^{da}-CO-$  中、 $R^{da}$  で示される $C_1-6$  アルキル基としては、たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシルなどが、 $C_2-6$  アルケニル基としてはビニル、アリル、1-プロペニル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-ヘキセニルなどが、 $C_3-8$  シクロアルキル基としては、たとえばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチルなどが挙げられる。

$R^{d1}$  で示されるハロゲン原子としてはたとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが、 $C_1-6$  アルキル基としては、たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシルなどが、 $C_2-4$  アルケニル基としては、たとえばビニル、1-プロペニル、2-プロペニル、イソプロペニル、ブテニル、イソブテニルなどが、 $C_1-4$  アルカノイル基としては、たとえばホルミル、アセチル、プロピオニル、ブチリルなどが、 $C_1-4$  アルコキシ基としては、たとえばメトキシ、エトキシ、プロポキシなどが挙げられる。

$R^{d2}$  で示されるハロゲンとしてはたとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが挙げられる。

$R^{d2}$  で示される「置換基としてハロゲンまたは $C_1-4$  アルコキシを有していてもよい $C_1-6$  アルキル」における $C_1-6$  アルキルとしては、たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシルなどが挙げられ、置換基としてのハロゲンとしては、たとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが、また置換基としての $C_1-4$  アルコキシとしては、たとえばメトキシ、エトキシ、 $n$ -プロポキシ、イソプロポキシ、 $n$ -ブトキシ、イソブトキシ、 $sec$ -ブトキシ、 $tert$ -ブトキシなどが挙げられる。

$R^{d2}$ で示される「置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$ アルコキシを有しているもよい $C_{1-4}$ アルコキシ」における $C_{1-4}$ アルコキシとしては、たとえばメトキシ、エトキシ、 $n$ -プロポキシ、イソプロポキシ、 $n$ -ブトキシ、イソブトキシ、 $sec$ -ブトキシ、 $tert$ -ブトキシなどが挙げられ、置換基としてのハロゲンとしては、たとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが、また置換基としての $C_{1-4}$ アルコキシとしては、たとえばメトキシ、エトキシ、 $n$ -プロポキシ、イソプロポキシ、 $n$ -ブトキシ、イソブトキシ、 $sec$ -ブトキシ、 $tert$ -ブトキシなどが挙げられる。

$R^{d2}$ で示される $C_{1-4}$ アルカノイルアミノとしては、たとえばホルミルアミノ、アセチルアミノ、プロピオニルアミノ、ブチルアミノなどが挙げられる。

$R^{d2}$ で表される $SO_2NR^{db}R^{dc}$ 、 $CONR^{db}R^{dc}$ および $NR^{db}R^{dc}$ 中、 $R^{db}$ および $R^{dc}$ で示される「置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$ アルコキシを有しているもよい $C_{1-6}$ アルキル基」としては、 $R^{d2}$ で示される「置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$ アルコキシを有しているもよい $C_{1-6}$ アルキル」と同様のものが挙げられ、「置換基としてハロゲンまたは $C_{1-4}$ アルコキシを有しているもよい $C_{3-8}$ シクロアルキル基」としては、たとえばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチルなどが挙げられ、置換基としてのハロゲンとしては、たとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが、また置換基としての $C_{1-4}$ アルコキシとしては、たとえばメトキシ、エトキシ、 $n$ -プロポキシ、イソプロポキシ、 $n$ -ブトキシ、イソブトキシ、 $sec$ -ブトキシ、 $tert$ -ブトキシなどが挙げられる。

#### 【0057】

$R^{d2}$ で表される $SO_2NR^{db}R^{dc}$ 、 $CONR^{db}R^{dc}$ および $NR^{db}R^{dc}$ 中、 $R^{db}$ と $R^{dc}$ が結合して窒素原子と共に環状アミノ基を形成する場合、該環状アミノ基としては、たとえば1) 1-アゼチジニル、2) 1-ピロリジニル、3) 1-ピペリジニル、4) 4-モルホリニル、5) 1-ピペラジニルおよび6) 4位に $C_{1-6}$ アルキル（たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、 $t$ -ブチル、ペンチル、ヘキシルなど）、 $C_7$

$-C_{10}$  アラルキル (たとえばベンジル、フェネチルなど) または  $C_{6-10}$  アリール (たとえばフェニル、1-ナフチル、2-ナフチルなど) を有していてもよい 1-ピペラジニルなどが挙げられる。

$R^{d2}$  で表される  $NR^{da}-SO_2R^{dd}$  中、 $R^{da}$  は  $B^d$  で表される  $-NR^{da}-SO_2-$  および  $-NR^{da}-CO-$  における  $R^{da}$  の定義と同じである。

$R^{d2}$  で表される  $SO_2R^{dd}$  および  $NR^{da}-SO_2R^{dd}$  中、 $R^{dd}$  で示される  $C_{1-6}$  アルキル基としては、たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシルなどが、 $C_{3-8}$  シクロアルキル基としては、たとえばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチルなどがそれぞれ挙げられる。

式 (IV)、(III d) および (IV d) において、 $A^d$  で表される式 (d1)、(d2)、(d3)、(d4)、(d5) および (d6) 中、 $R^{d3}$  で示される置換基を有していてもよい炭化水素基における炭化水素基としては、たとえば  $C_{1-6}$  アルキル (たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシルなど)、 $C_{2-6}$  アルケニル (たとえばビニル、アリル、1-プロペニル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-ヘキセニルなど)、 $C_{2-6}$  アルキニル (たとえばエチニル、2-プロピニル、2-ブチニル、5-ヘキシニルなど)、 $C_{3-8}$  シクロアルキル (たとえばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチルなど)、 $C_{6-10}$  アリール (たとえばフェニル、ナフチルなど) などが挙げられる。

該炭化水素基の置換基としては、たとえばハロゲン (たとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、 $C_{1-4}$  アルコキシ (たとえばメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシなど)、フェニル、 $C_{1-6}$  アルキル (たとえばメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、ヘキシルなど)、ニトロ、シアノ、ヒドロキシ、 $C_{1-4}$  アルカノイルアミノ (たとえばホルミルアミノ、アセチルアミノ、プロピオニルアミノなど)、カルバモイル、スルファモイルなどが挙げられる。上記の中でも

、該炭化水素基が $C_{1-6}$ アルキル、 $C_{2-6}$ アルケニルまたは $C_{2-6}$ アルキニル、であるとき、その置換基としてはハロゲン、 $C_{1-4}$ アルコキシおよびフェニルが好ましく、該炭化水素基が $C_{3-8}$ シクロアルキルであるとき、その置換基としてはハロゲン、 $C_{1-6}$ アルキルおよび $C_{1-4}$ アルコキシが好ましく、該炭化水素基が $C_{6-10}$ アリールであるとき、その置換基としてはハロゲン、 $C_{1-6}$ アルキル、 $C_{1-4}$ アルコキシ、ニトロ、シアノ、ヒドロキシ、 $C_{1-4}$ アルカノイルアミノ、カルバモイルおよびスルファモイルが好ましい。

$R^{d3}$ で示される置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基における $C_{1-4}$ アルコキシとしては、たとえばメトキシ、エトキシ、プロポキシなどが挙げられ、 $R^{d3}$ で示される置換基を有していてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ基における置換基としてはたとえばハロゲン（たとえばフッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、フェニルなどが挙げられる。

#### 【0058】

$R^{d3}$ で示される置換基を有していてもよいアミノ基としては、無置換のアミノ基の他、たとえば $C_{1-6}$ アルキルアミノ（たとえばメチルアミノ、エチルアミノ、プロピルアミノ、イソプロピルアミノ、ブチルアミノ、イソブチルアミノ、*t*-ブチルアミノ、ペンチルアミノ、ヘキシルアミノなど）、ジ（ $C_{1-6}$ アルキル）アミノ（たとえばジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジプロピルアミノ、ジブチルアミノなど）、 $C_{1-4}$ アルコキシアミノ（たとえばメトキシアミノ、エトキシアミノ、*n*-プロポキシアミノ、イソプロポキシアミノ、*n*-ブトキシアミノ、イソブトキシアミノ、*sec*-ブトキシアミノ、*tert*-ブトキシアミノなど）などが挙げられる。

$R^{d4}$ および $R^{d5}$ で示される $C_{1-6}$ アルキル基としては、たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシルなどが挙げられる。

$R^{d6}$ で示される $C_{1-6}$ アルキル基としては、たとえばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*t*-ブチル、ペンチル、ヘキシルなどが挙げられ、 $C_{2-6}$ アルケニル基としては、たとえばビニル、アリル、1-プロペニル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-ヘキセニルな

どが挙げられる。

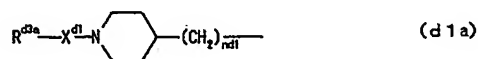
式 (IV) で表される化合物またはその塩 (以下単に化合物 (IV) という) のなかでも次の化合物が好ましい。

(IV-1)  $R^{d3}$  が 1) 置換基としてハロゲン、 $C_{1-4}$  アルコキシまたはフェニルを有していてもよい  $C_{1-6}$  アルキル基、2)  $C_{2-6}$  アルケニル基、3)  $C_{2-6}$  アルキニル基、4) 置換基としてハロゲン、 $C_{1-6}$  アルキルまたは  $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよい  $C_{3-8}$  シクロアルキル基、5) 置換基としてハロゲン、 $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{1-4}$  アルコキシ、ニトロ、シアノ、ヒドロキシ、 $C_{1-4}$  アルカノイルアミノ、カルバモイルまたはスルファモイルを有していてもよい  $C_{6-10}$  アリール基、基 6) 置換基としてハロゲンまたはフェニルを有していてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ基または 7) 置換基として 1 または 2 個の  $C_{1-6}$  アルキルまたは  $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよいアミノ基である化合物、

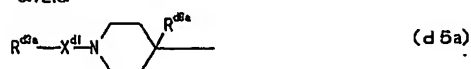
(IV-2)  $R^{d3}$  が 1)  $C_{1-6}$  アルキル基、2)  $C_{2-6}$  アルケニル基、3)  $C_{3-8}$  シクロアルキル基、4)  $C_{1-4}$  アルコキシ基または 5) 置換基として  $C_{1-6}$  アルキルまたは  $C_{1-4}$  アルコキシを有していてもよいアミノ基、 $X^{d1}$  が  $-SO_2-$  または  $-CO-$ 、 $n^{d1}$  が 1 または 2、 $m^{d1}$  が 0、1、または 2、 $R^{d4}$  および  $R^{d5}$  がそれぞれ同一または異なって水素原子またはメチル基、 $R^{d6}$  がヒドロキシ基、メチル基または  $C_{2-6}$  アルケニル基および  $r^{d1}$  が 3 である化合物、

(IV-3)  $A^{d1}$  が

【化 22】



または



(ただし、 $R^{d3a}$  は  $C_{1-6}$  アルキル基を、 $X^{d1}$  は  $-SO_2-$  または  $-CO-$  を、 $n^{d1}$  は 1 または 2 を、 $R^{d6a}$  はヒドロキシ基またはメチル基をそれぞ

れ示す)で表される基、 $r^d$ が3、 $B^d$ が $-\text{CH}_2-$ 、 $p^d$ および $q^d$ がそれぞれ0、1または2、 $R^{d1}$ がハロゲン原子、メチル基、 $R^{d2}$ がハロゲン、 $C_{1-4}$ アルコキシ、ニトロ、 $C_{1-4}$ アルカノイルアミノ、 $\text{SO}_2\text{NR}^{db}R^{dc}$ 、 $\text{SO}_2R^{dd}$ 、 $\text{CONR}^{db}R^{dc}$ 、 $\text{NR}^{db}R^{dc}$ または $\text{NR}^{da}-\text{SO}_2R^{dd}$  (ただし、 $R^{da}$ は水素原子、 $C_{1-6}$ アルキル基、 $C_{2-6}$ アルケニル基または $C_{3-8}$ シクロアルキル基、 $R^{db}$ および $R^{dc}$ は同一または異なって水素原子、 $C_{1-6}$ アルキル基または $C_{3-8}$ シクロアルキル基を示すか、または $R^{db}$ と $R^{dc}$ が結合して窒素原子と共に環状アミノ基を形成していてもよく、 $R^{dd}$ は $C_{1-6}$ アルキル基または $C_{3-8}$ シクロアルキル基を示す)である化合物、

などが好ましい。

#### 【0059】

上記式(e I)中、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」としては、ベンゼンなどの6員の芳香族炭化水素、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロペンテン、シクロヘキセン、シクロペンタンジエン、シクロヘキサンジエンなどの5～6員の脂肪族炭化水素、フラン、チオフェン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の芳香族複素環、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピランなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の非芳香族複素環などから水素原子1個を除いて形成される基などが挙げられるが、なかでも、「5～6員環」としては、ベンゼン、フラン、チオフェン、ピリジン、シクロペンタン、シクロヘキサン、ピロリジン、ピペリジン、ピペラジン、モルホリン、チオモルホリン、テトラヒド

ロピラン（好ましくは、6員環）などが好ましく、とりわけベンゼンが好ましい。

$R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」としては、例えば、ハロゲン原子、ニトロ、シアノ、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよい水酸基、置換されていてもよいチオール基（硫黄原子は酸化されていてもよく、置換されていてもよいスルフィニル基または置換されていてもよいスルホニル基を形成していてもよい）、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよいアシル、エステル化されていてもよいカルボキシル基、置換されていてもよい芳香族基などが用いられる。

$R^{e1}$ の置換基としてのハロゲンの例としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが挙げられ、とりわけフッ素および塩素が好ましい。

$R^{e1}$ の置換基としての置換されていてもよいアルキルにおけるアルキルとしては、直鎖状または分枝状の炭素数1～10のアルキル、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級（ $C_{1-6}$ ）アルキルが挙げられる。該置換されていてもよいアルキルにおける置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ- $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシメトキシ



、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

# 【0060】

$R^{e1}$  の置換基としての置換されていてもよいシクロアルキルにおけるシクロアルキルとしては、例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキルなどが挙げられる。該置換されていてもよいシクロアルキルにおける置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基 (例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ- $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

$R^{e1}$  の置換基としての置換されていてもよい水酸基における置換基としては、(1) 置換されていてもよいアルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、

デシルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルなどが挙げられる) ;

(2) 置換されていてもよく、ヘテロ原子を含有していてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキル ; テトラヒドロフラン、テトラヒドロチエニル、ピロリジニル、ピラゾリジニル、ピペリジル、ピペラジニル、モルホリニル、チオモルホリニル、テトラヒドロピラニル、テトラヒドロチオピラニルなどの 1~2 個のヘテロ原子を含有する飽和の 5~6 員複素環基など (好ましくはテトラヒドロピラニルなど) ; などが挙げられる) ;

(3) 置換されていてもよいアルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数 2~10 のアルケニル、好ましくは低級 ( $C_{2-6}$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数 3~7 のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(5) 置換されていてもよいアラルキル (例えば、フェニル- $C_{1-4}$  アルキル (例、ベンジル、フェネチルなど) などが挙げられる) ;

(6) ホルミルまたは置換されていてもよいアシル (例えば、炭素数 2~4 のアルカノイル (例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど)、炭素数 1~4 のアルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられる) ;

(7) 置換されていてもよいアリアル (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などの置換基が挙げられ、

上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアルケニル、(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル、(5) 置換されていてもよいアラルキル、(6) 置換されていてもよいアシル、および (7) 置換されていてもよいアリアルが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、

C<sub>1-4</sub> アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノC<sub>1-4</sub> アルキルアミノ、ジC<sub>1-4</sub> アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、C<sub>1-4</sub> アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノC<sub>1-4</sub> アルキルカルバモイル、ジC<sub>1-4</sub> アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよいC<sub>1-4</sub> アルキル(例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよいC<sub>1-6</sub> アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど; 好ましくはハロゲン化されていてもよいC<sub>1-4</sub> アルコキシ)、ホルミル、C<sub>2-4</sub> アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、C<sub>1-4</sub> アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)、置換されていてもよい5~6員の芳香族複素環〔例、フラン、チオフェン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1~2種のヘテロ原子1~4個を含有する5~6員の芳香族複素環など; 該複素環が有していてもよい置換基としては、ハロゲン(例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、チオール基、アミノ基、カルボキシル基、ハロゲン化されていてもよいC<sub>1-4</sub> アルキル(例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよいC<sub>1-4</sub> アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、C<sub>2-4</sub> アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、C<sub>1-4</sub> アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。〕  
 などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

## 【0061】

R<sup>e1</sup>の置換基としての置換されていてもよいチオール基における置換基としては、上記した「R<sup>e1</sup>の置換基としての置換されていてもよい水酸基における

置換基」と同様なものが挙げられるが、なかでも

(1) 置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級（ $C_{1-6}$ ）アルキルなどが挙げられる）；

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル（例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_3-7$ シクロアルキルなどが挙げられる）；

(3) 置換されていてもよいアラルキル（例えば、フェニル- $C_{1-4}$ アルキル（例、ベンジル、フェネチルなど）などが挙げられる）；

(4) 置換されていてもよいアリール（例えば、フェニル、ナフチルなど）が挙げられる）などが好ましく、

上記した(1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアラルキル、および(4) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ- $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルな

ど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3 個が好ましい。

【0062】

$R^{e1}$  の置換基としての置換されていてもよいアミノ基の置換基としては、上記した「 $R^{e1}$  の置換基としての置換されていてもよい水酸基における置換基」と同様な置換基を 1~2 個有していてもよいアミノ基などが挙げられるが、なかでも (1) 置換されていてもよいアルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルなどが挙げられる) ;

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキルなどが挙げられる) ;

(3) 置換されていてもよいアルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数 2~10 のアルケニル、好ましくは低級 ( $C_{2-6}$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数 3~7 のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(5) ホルミルまたは置換されていてもよいアシル (例えば、炭素数 2~4 のアルカノイル (例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど)、炭素数 1~4 のアルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられる) ;

(6) 置換されていてもよいアリール (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などが好ましく、

上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアルケニル、(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル、(5) 置換されていてもよいアシル、および (6)

置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ- $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

### 【0063】

また、 $R^{e1}$  の置換基としての置換されていてもよいアミノ基は、アミノ基の置換基同士が結合して、環状アミノ基（例えば、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員環の環構成窒素原子から水素原子1個を除いて形成され、窒素原子上に結合手を有する環状アミノ基など）を形成していてもよい。該環状アミノ基は、置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$

アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ- $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

## 【0064】

$R^{e1}$ の置換基としての置換されていてもよいアシルとしては、

- (1) 水素、
- (2) 置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級（ $C_{1-6}$ ）アルキルなどが挙げられる）；
- (3) 置換されていてもよいシクロアルキル（例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$ シクロアルキルなどが挙げられる）；
- (4) 置換されていてもよいアルケニル（例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2～10のアルケニル、好ましくは低級（ $C_{2-6}$ ）アルケニルなどが挙げられる）；
- (5) 置換されていてもよいシクロアルケニル（例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3～7のシクロアルケニルなどが挙げられる）；
- (6) 置換されていてもよい5～6員の単環の芳香族基（例えば、フェニル、ピリジルなどが挙げられる）などがカルボニル基またはスルホニル基と結合したものの（例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリル、パレリル、イソバ

レリル、ピバロイル、ヘキサノイル、ヘプタノイル、オクタノイル、シクロブタンカルボニル、シクロペンタンカルボニル、シクロヘキサンカルボニル、シクロヘプタンカルボニル、クロトニル、2-シクロヘキセンカルボニル、ベンゾイル、ニコチノイル、メタンスルホニル、エタンスルホニル等)が挙げられ、上記した(2)置換されていてもよいアルキル、(3)置換されていてもよいシクロアルキル、(4)置換されていてもよいアルケニル、(5)置換されていてもよいシクロアルケニル、および(6)置換されていてもよい5~6員の単環の芳香族基が有していてもよい置換基としては、ハロゲン(例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基(例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ- $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

#### 【0065】

$R^{e1}$ の置換基としてのエステル化されていてもよいカルボキシル基としては、(1)水素、(2)置換されていてもよいアルキル(例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デ



シルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルなどが挙げられる) ;

(3) 置換されていてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキルなどが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいアルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数 2~10 のアルケニル、好ましくは低級 ( $C_{2-6}$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(5) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数 3~7 のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(6) 置換されていてもよいアリアル (例えば、フェニル、ナフチルなど) などがカルボニルオキシ基と結合したものの、好ましくはカルボキシル、低級 ( $C_{1-6}$ ) アルコキシカルボニル、アリアルオキシカルボニル (例、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、フェノキシカルボニル、ナフトキシカルボニルなど) などが挙げられ、上記した (2) 置換されていてもよいアルキル、(3) 置換されていてもよいシクロアルキル、(4) 置換されていてもよいアルケニル、(5) 置換されていてもよいシクロアルケニル、および (6) 置換されていてもよいアリアルが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの 5~6 員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基 (例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ハロゲン化されていてもよ

い  $C_{1-4}$  アルコキシ- $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

# 【0066】

$R^{e1}$  の置換基としての置換されていてもよい芳香族基における芳香族基としては、フェニル、ピリジル、フリル、チエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、イソチアゾリル、イソキサゾリル、テトラゾリル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル、トリアゾリル等の5~6員の同素または複素環芳香族基、ベンゾフラン、インドール、ベンゾチオフェン、ベンズオキサゾール、ベンズチアゾール、インダゾール、ベンズイミダゾール、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、フタラジン、キナゾリン、シンノリンなどの縮環複素環芳香族基などが挙げられる。これらの芳香族基の置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基 (例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

かかる  $R^{e1}$  の置換基は、1~4個 (好ましくは、1~2個) 同一または異なる

って環のいずれの位置に置換していてもよい。また、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環」の「5～6員環」が2個以上の置換基を有する場合、これらのうち、2個の置換基が互いに結合して、例えば、低級( $C_{1-6}$ )アルキレン(例、トリメチレン、テトラメチレンなど)、低級( $C_{1-6}$ )アルキレンオキシ(例、 $-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ など)、低級( $C_{1-6}$ )アルキレンチオ(例、 $-\text{CH}_2-\text{S}-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{S}-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ など)、低級( $C_{1-6}$ )アルキレンジオキシ(例、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{O}-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-$ など)、低級( $C_{1-6}$ )アルキレンジチオ(例、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{S}-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{S}-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{S}-$ など)、オキシ低級( $C_{1-6}$ )アルキレンアミノ(例、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{NH}-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}-$ など)、オキシ低級( $C_{1-6}$ )アルキレンチオ(例、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{S}-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{S}-$ など)、低級( $C_{1-6}$ )アルキレンアミノ(例、 $-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ など)、低級( $C_{1-6}$ )アルキレンジアミノ(例、 $-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{NH}-$ 、 $-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}-$ など)、チア低級( $C_{1-6}$ )アルキレンアミノ(例、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{NH}-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}-$ など)、低級( $C_{2-6}$ )アルケニレン(例、 $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-$ など)、低級( $C_{4-6}$ )アルカジエニレン(例、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-$ など)などを形成していてもよい。

## 【0067】

さらに、 $R^{e1}$ の置換基2個が互いに結合して形成する2価の基は、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様な置換基(ハロゲン原子、ニトロ、シアノ、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよい

い水酸基、置換されていてもよいチオール基（硫黄原子は酸化されていてもよく、置換されていてもよいスルフィニル基または置換されていてもよいスルホニル基を形成していてもよい）、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよいアシル、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基、置換されていてもよい芳香族基など）を1～3個有していてもよい。

$R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」としては、とりわけ、ハロゲン化または低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ化されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル（例、メチル、エチル、*n*-ブチル、トリフルオロメチル、メトキシメチル、エトキシメチル、プロポキシメチル、ブトキシメチル、メトキシエチル、エトキシエチル、プロポキシエチル、ブトキシエチルなど）、ハロゲン化または低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ化されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、*n*-ブトキシ、トリフルオロメトキシ、メトキシメトキシ、エトキシメトキシ、プロポキシメトキシ、ブトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、プロポキシエトキシ、ブトキシエトキシ、メトキシプロポキシ、エトキシプロポキシ、プロポキシプロポキシ、ブトキシプロポキシなど）、ハロゲン（例、フッ素、塩素など）、ニトロ、シアノ、1～2個の低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、ホルミルまたは低級（ $C_{2-4}$ ）アルカノイルで置換されていてもよいアミノ（例、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ホルミルアミノ、アセチルアミノなど）、5～6員の環状アミノ基（例、1-ピロリジニル、1-ピペラジニル、1-ピペリジニル、4-モルホリノ、4-チオモルホリノ、1-イミダゾリル、4-テトラヒドロピラニルなど）などが挙げられる。

$X^{e1}$ および $X^{e2}$ で示される「直鎖部分を構成する原子数が1ないし4個である2価の基」としては、例えば、 $-(CH_2)_{e_a}-$  [ $e_a$ は1～4の整数（好ましくは1～2の整数）を示す]、 $-(CH_2)_{e_b}-X^{e3}-$  [ $e_b$ は0～3の整数（好ましくは0～1の整数）を示し、 $X^{e3}$ は置換されていてもよいイミノ基（例、低級（ $C_{1-6}$ ）低級アルキル、低級（ $C_{3-7}$ ）シクロアルキル、ホルミル、低級（ $C_{2-7}$ ）低級アルカノイル、低級（ $C_{1-6}$ ）低級アルコキシ-カルボニルなどで置換されていてもよいイミノ基など）、カルボ

ニル基、酸素原子または酸化されていてもよい硫黄原子（例、 $-\text{S}(\text{O})_{e_m}-$ （ $e_m$ は0～2の整数を示す）など）を示す]、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{CO}-\text{NH}-$ 、 $-\text{SO}_2-\text{NH}-$ などが挙げられる。これらの基が $\text{W}^e$ と結合するのは、左右何れの結合手であってもよいが、 $\text{X}^{e1}$ の場合、右側の結合手を介して $\text{W}^e$ と結合するのが好ましく、 $\text{X}^{e2}$ の場合、左側の結合手を介して $\text{W}^e$ と結合するのが好ましい。

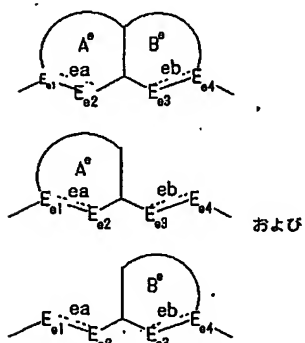
## 【0068】

$\text{X}^{e1}$ としては、結合手、 $-(\text{CH}_2)_{e_{b'}}-\text{O}-$  [ $e_{b'}$ は0, 1または2の整数（好ましくは0～1の整数）を示す]、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ などが好ましく、結合手がさらに好ましい。

$\text{X}^{e2}$ としては、 $-(\text{CH}_2)_{e_{a''}}-$  [ $e_{a''}$ は1～2の整数を示す]、 $-(\text{CH}_2)_{e_{b''}}-\text{X}^{e3}-$  [ $e_{b''}$ は0～1の整数を示し、 $\text{X}^{e3}$ は置換されていてもよいイミノ基、カルボニル基、酸素原子または酸化されていてもよい硫黄原子を示す]、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CO}-\text{NH}-$ 、 $-\text{SO}_2-\text{NH}-$ などが好ましく、 $-\text{CO}-\text{NH}-$ がさらに好ましい。

上記式 (e I) 中、 $\text{W}^e$  で示される式：

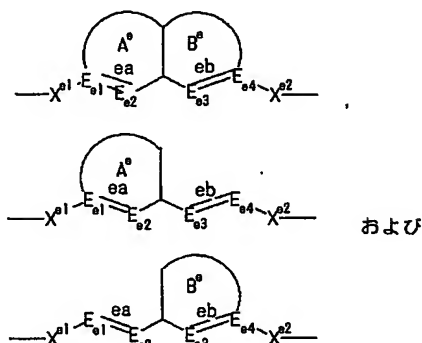
## 【化23】



（式中、環 $\text{A}^e$ および環 $\text{B}^e$ はそれぞれ置換されていてもよい5～7員環を示し、 $\text{E}_{e1}$ および $\text{E}_{e4}$ はそれぞれ置換されていてもよい炭素原子または置換されていてもよい窒素原子を示し、 $\text{E}_{e2}$ および $\text{E}_{e3}$ はそれぞれ置換されていてもよい炭素原子、置換されていてもよい窒素原子、酸化されていてもよい硫黄原子（例、 $-\text{S}(\text{O})_{e_m}-$ （ $e_m$ は0～2の整数を示す）など）または酸素原子を示し、 $e_a$ および $e_b$ はそれぞれ単結合または二重結合であることを示す）で表さ

れる2価の基は、それぞれ

【化24】



(式中の各記号は前記と同意義) のような様式で隣接するX<sup>e1</sup> およびX<sup>e2</sup> と結合していることを示す。

上記式 (e I) 中、A<sup>e</sup> で示される「置換されていてもよい5～7員環」の「5～7員環」としては、C<sub>5</sub>～<sub>7</sub>シクロアルカン (例、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン等)、C<sub>5</sub>～<sub>7</sub>シクロアルケン (例、1-シクロペンテン、2-シクロペンテン、3-シクロペンテン、2-シクロヘキセン、3-シクロヘキセン等)、C<sub>5</sub>～<sub>6</sub>シクロアルカジエン (例、2,4-シクロペンタジエン、2,4-シクロヘキサジエン、2,5-シクロヘキサジエン等) などの5～7員 (好ましくは5～6員) の飽和又は不飽和の脂環式炭化水素; ベンゼンなどの6員の芳香族炭化水素; 酸素原子、硫黄原子、窒素原子等から選ばれたヘテロ原子1ないし3種 (好ましくは1ないし2種) を少なくとも1個 (好ましくは1ないし4個、さらに好ましくは1ないし2個) 含む5～7員の芳香族複素環、飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環 (脂肪族複素環) 等; などが挙げられる。

ここで「芳香族複素環」としては、5～6員の芳香族単環式複素環 (例えばフラン、チオフェン、ピロール、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、イミダゾール、ピラゾール、1,2,3-オキサジアゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,3,4-オキサジアゾール、フラザン、1,2,3-チアジアゾール、1,2,4-チアジアゾール、1,3,4-チアジアゾール、1,2,3-トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、テトラゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン等) などが挙げられ、「非芳香族複素環」としては、例えばピロリジン、テトラヒドロフラン、チオラン、ピペリ

ジン、テトラヒドロピラン、モルホリン、チオモルホリン、ピペラジン、ピラン、オキセピン、チエピン、アゼピン等の5～7員（好ましくは5～6員）の飽和あるいは不飽和の非芳香族複素環（脂肪族複素環）など、あるいは前記した芳香族単環式複素環の一部又は全部の二重結合が飽和した5～6員の非芳香族複素環などが挙げられる。

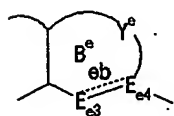
## 【0069】

$A^e$ で示される「置換されていてもよい5～7員環」の「5～7員環」としては、5～6員の芳香環が好ましく、さらにベンゼン、フラン、チオフェン、ピロール、ピリジン（好ましくは、6員環）などが好ましく、とりわけベンゼンが好ましい。

$A^e$ で示される「置換されていてもよい5～7員環」の「5～7員環」が有していてもよい「置換基」としては、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様なものが挙げられる。また、かかる $A^e$ の置換基は、1～4個（好ましくは、1～2個）同一または異なって環のいずれの位置に置換していてもよく、 $E_{e1}$ および $E_{e2}$ で示される位置あるいはその他の位置の何れであっても、置換可能な位置であればいずれの位置に置換基を有していてもよい。

上記式(e I)中、 $B^e$ で示される「置換されていてもよい5～7員環」の「5～7員環」としては、例えば  
式：

## 【化25】



で表される、置換可能な任意の位置に置換基を有していてもよい5～7員環などが挙げられる。

上記式中、 $Y^e$ で示される2価の基は、環 $B^e$ が置換されていてもよい5～7員環を形成する2価の基を示し、例えば、

(1)  $-(CH_2)_{e_{a1}}-O-(CH_2)_{e_{a2}}-$  ( $e_{a1}$  および  $e_{a2}$  は同一または異なって0, 1または2を示す。但し、 $e_{a1}$  および  $e_{a2}$  との和は2以下

である)、

$-\text{O}-(\text{CH}=\text{CH})-$ 、 $-(\text{CH}=\text{CH})-\text{O}-$ 、

(2)  $-(\text{CH}_2)_{e_{b1}}-\text{S}(\text{O})_{e_m}-(\text{CH}_2)_{e_{b2}}-$  ( $e_m$ は0~2の整数を示し、 $e_{b1}$ および $e_{b2}$ は同一または異なって0, 1または2を示す。但し、 $e_{b1}$ および $e_{b2}$ との和は2以下である)、

$-\text{S}(\text{O})_{e_m}-(\text{CH}=\text{CH})-$ 、 $-(\text{CH}=\text{CH})-\text{S}(\text{O})_{e_m}-$ 、

(3)  $-(\text{CH}_2)_{e_{d1}}-$  ( $e_{d1}$ は1, 2または3を示す)、 $-\text{CH}_2-(\text{CH}=\text{CH})-$ 、 $-(\text{CH}=\text{CH})-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=-$ 、

(4)  $-(\text{CH}_2)_{e_1}-\text{NH}-(\text{CH}_2)_{e_2}-$  ( $e_1$ および $e_2$ は同一または異なって0, 1または2を示す。但し、 $e_1$ および $e_2$ との和は2以下である)、

$-\text{NH}-(\text{CH}=\text{CH})-$ 、 $-(\text{CH}=\text{CH})-\text{NH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_{e_6}-(\text{N}=\text{CH})-(\text{CH}_2)_{e_7}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_{e_7}-(\text{CH}=\text{N})-(\text{CH}_2)_{e_6}-$  ( $e_6$ および $e_7$ はいずれかが0を示し、他方は0または1を示す)、 $-(\text{CH}_2)_{e_8}-$

$(\text{N}=\text{N})-(\text{CH}_2)_{e_9}-$  ( $e_8$ および $e_9$ はいずれかが0を示し、他方は0または1を示す) などが挙げられる。具体的には、例えば、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_{e_m}-$  ( $e_m$ は0~2の整数を示す)、 $-\text{S}(\text{O})_{e_m}-\text{CH}_2-$  ( $e_m$ は0~2の整数を示す)、 $-\text{S}(\text{O})_{e_m}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$  ( $e_m$ は0~2の整数を示す)、 $-\text{S}(\text{O})_{e_m}-\text{CH}=\text{CH}-$  ( $e_m$ は0~2の整数を示す)、 $-\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{NH}-$ 、 $-\text{N}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}=\text{N}-$ 、 $-\text{N}=\text{N}-$  (それぞれ、環A<sup>e</sup>を起点とした結合を示す) などの2価の基が挙げられる。

#### 【0070】

また、該2価の基は、置換基を有していてもよく、該置換基としては、R<sup>e1</sup>で示される「置換されていてもよい5~6員環基」の「5~6員環」が有していてもよい「置換基」と同様なものおよびオキソなどが挙げられるが、なかでも、低級(C<sub>1-3</sub>)アルキル(例、メチル、エチル、プロピルなど)、フェニル、オキソ、水酸基などが好ましい。さらに、該2価の基としては、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})-$  (環A<sup>e</sup>を起点とした結合を示す) などのようなものでもよい。かかる2価の基



の置換基は、1～4個（好ましくは、1～2個）同一または異なって置換していてもよい。置換位置は、該2価の基に結合可能であればいずれでもよい。

$Y^e$ で示される2価の基としては、環 $A^e$ を起点として $-Y^{e'}-(CH_2)_{e_m}$ 、 $-(Y^{e'}は-S(O)_{e_m}-(e_mは0\sim2の整数を示す)、-O-、-NH-または-CH_2-$ を示し、 $e_m'$ は0～2の整数を示す)、 $-CH=$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-N=CH-$ 、 $-(CH_2)_{e_m}$ 、 $-Y^{e'}-(Y^{e'}は-S(O)_{e_m}-(e_mは0\sim2の整数を示す)、-O-、-NH-または-CH_2-$ を示し、 $e_m'$ は0～2の整数を示す)、 $-CH=N-$ などの基が好ましく、なかでも環 $A^e$ を起点として $-Y^{e'}-(CH_2)_{e_m}$ 、 $-(Y^{e'}は-S(O)_{e_m}-(e_mは0\sim2の整数を示す)、-O-、-NH-または-CH_2-$ を示し、 $e_m'$ は0～2の整数を示す)、 $-CH=$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-N=CH-$ などの基が好ましく、とりわけ環 $A^e$ を起点として $-Y^{e'}-(CH_2)_2-(Y^{e'}は-S(O)_{e_m}-(e_mは0\sim2の整数を示す)、-O-、-NH-または-CH_2-$ などの基（環 $B^e$ は置換されていてもよい5～7員環を示す）が好ましい。

$B^e$ で示される「置換されていてもよい5～7員環」の「5～7員環」が有していてもよい「置換基」としては、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様なものおよびオキソなどが挙げられる。また、かかる $B^e$ の置換基は、1～4個（好ましくは、1～2個）同一または異なって環のいずれの位置に置換していてもよいが、 $E_{e3}$ の位置は無置換であることが好ましい。

上記式(e I)中、 $E_{e3}$ および $E_{e4}$ がそれぞれ置換されていてもよい炭素原子（好ましくは無置換の炭素原子）であり、 $e_b$ が二重結合である化合物が好ましい。

上記式(e I)中、 $Z^{e1}$ で示される「2価の環状基」としては、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」と同様なものから水素原子2個を除いて形成される基などが挙げられ、なかでもベンゼン、フラン、チオフェン、ピリジン、シクロペンタン、シクロヘキサン、ピロリジン、ペリジン、ピペラジン、モルホリン、チオモルホリン、テトラヒドロピランなどから水素原子2個を除いて形成される2価の環状基が好ましく、とりわけベンゼ

ン、シクロヘキサン、ピペリジン（好ましくはベンゼン）から水素原子2個を除いて形成される2価の環状基が好ましく用いられる。

## 【0071】

$Z^{e1}$ で示される「2価の環状基」は、 $R^{e1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様な置換基を有していてもよいが、 $X^{e2}$ および $Z^{e2}$ 以外の置換基を有していないことが好ましく、また、 $Z^{e1}$ が6員の2価の環状基（好ましくはフェニレン）であるとき、 $Z^{e2}$ の置換位置は $X^{e2}$ のパラ位であることが好ましい。

上記式(e I)中、 $Z^{e2}$ で示される「直鎖部分を構成する炭素原子数が1ないし4個である2価の基」は、置換基を有していてもよい炭素数1ないし4の炭化水素鎖を有する2価の基（例、 $C_{1-4}$ アルキレン、 $C_{2-4}$ アルケニレンなど、好ましくは、 $C_{1-3}$ アルキレン、さらに好ましくはメチレン）などが挙げられる。

$Z^{e2}$ で示される2価の基としては、直鎖部分を構成する炭素原子数が1ないし4個である2価の鎖であればいずれでもよく、例えば $-(CH_2)_{ek1}-$  ( $ek_1$ は1～4の整数)で表されるアルキレン鎖、 $-(CH_2)_{ek2}-(CH=CH)-(CH_2)_{ek3}-$  ( $ek_2$ および $ek_3$ は同一または異なって0, 1または2を示す。但し、 $ek_2$ と $ek_3$ との和は2以下である)で表されるアルケニレン鎖などが挙げられる。

$X^{e1}$ 、 $X^{e2}$ および $Z^{e2}$ で示される2価の基は、任意の位置（好ましくは炭素原子上）に置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、直鎖部分を構成する2価の鎖に結合可能なものであればいずれでもよいが、例えば、低級( $C_{1-6}$ )アルキル（例、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシルなど）、低級( $C_{3-7}$ )シクロアルキル（例、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなど）、ホルミル、低級( $C_{2-7}$ )アルカノイル（例、アセチル、プロピオニル、ブチリルなど）、エステル化されていてもよいホスホノ基、エステル化されていてもよいカルボキシル基、水酸基、オキソなどが挙げられ、好ましくは、炭素数

1～6の低級アルキル（好ましくは、 $C_{1-3}$ アルキル）、水酸基、オキソなどが挙げられる。

該エステル化されていてもよいホスホノ基としては、 $-P(O)(OR^{e7})(OR^{e8})$  [式中、 $R^{e7}$  および  $R^{e8}$  はそれぞれ水素、炭素数1～6のアルキル基または炭素数3～7のシクロアルキル基を示し、 $R^{e7}$  および  $R^{e8}$  は互いに結合して5～7員環を形成していてもよい] で表されるものが挙げられる。

上記式中、 $R^{e7}$  および  $R^{e8}$  で表される炭素数1～6のアルキル基としては、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシルなどが挙げられ、炭素数3～7のシクロアルキルとしては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘブチルなどが挙げられるが、好ましくは、鎖状の炭素数1～6の低級アルキル、さらに好ましくは炭素数1～3の低級アルキルが挙げられる。 $R^{e7}$  および  $R^{e8}$  としては、同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。また、 $R^{e7}$  および  $R^{e8}$  は互いに結合して5～7員環を形成する場合、 $R^{e7}$  と  $R^{e8}$  とが互いに結合して、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_3-$ 、 $-(CH_2)_4-$  で表される直鎖状の  $C_{2-4}$  アルキレン側鎖を形成する。該側鎖は置換基を有していてもよく、例えばかかる置換基としては、水酸基、ハロゲンなどが挙げられる。

#### 【0072】

該エステル化されていてもよいカルボキシ基のエステル化されたカルボキシ基としては、カルボキシ基と炭素数1～6のアルキル基または炭素数3～7のシクロアルキル基とが結合したものの、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、イソプロポキシカルボニル、ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニル、sec-ブトキシカルボニル、tert-ブトキシカルボニル、ペンチルオキシカルボニル、ヘキシルオキシカルボニル等が挙げられる。

$Z^{e2}$  で示される2価の基としては、置換されていてもよい  $C_{1-3}$  アルキレン、なかでも  $C_{1-3}$  アルキル、水酸基またはオキソで置換されていてもよい  $C_{1-3}$  アルキレンが好ましい。

さらに、 $Z^{e2}$ で示される2価の基としては、ベンゼン環を起点として $-Z^e$   
 $-(CH_2)_{en}-$ または $-(CH_2)_{en}-Z^{e'}$  ( $Z^{e'}$ は $-CH(OH)-$ 、 $-C(O)-$ または $-CH_2-$ を示し、 $en$ は0~2の整数を示し、各メチレン基は1~2個の同一または異なった置換基を有していてもよい)で表される基、なかでも、ベンゼン環を起点として $-Z^{e'}$  ( $Z^{e'}$ は $-CH(OH)-$ 、 $-C(O)-$ または $-CH_2-$ を示し、 $en$ は0~2の整数 (好ましくは、 $en$ は0を示す)を示し、各メチレン基は1~2個の同一または異なった置換基を有していてもよい)で表される基、とりわけ、メチレンが好ましい。

上記式(e I)中、 $R^{e2}$ で示される「置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよいアミノ基」の「アミノ基」としては、1~2個の置換基を有していてもよいアミノ基、3個の置換基を有し、窒素原子が4級アンモニウム化されているアミノ基などが挙げられる。窒素原子上の置換基が2個以上である場合、それらの置換基は同一であっても異なってもよく、窒素原子上の置換基が3個である場合、 $-N^+(R^e)_3$ 、 $-N^+(R^e)_2R^{e'}$  および  $-N^+R^eR^{e'}R^{e''}$  ( $R^e$ 、 $R^{e'}$  および  $R^{e''}$  はそれぞれ異なって、水素または置換基を示す)のいずれのタイプのアミノ基であってもよい。また、窒素原子が4級アンモニウム化されているアミノ基のカウンター・アニオンとしては、ハロゲン原子の陰イオン (例、 $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$  など) などの他に、塩酸、臭化水素酸、硝酸、硫酸、リン酸などの無機酸から誘導される陰イオン、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、フマル酸、シュウ酸、酒石酸、マレイン酸、クエン酸、コハク酸、リンゴ酸、メタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸などの有機酸から誘導される陰イオン、アスパラギン酸、グルタミン酸などの酸性アミノ酸から誘導される陰イオンなどが挙げられるが、なかでも、 $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$  などが好ましい。

#### 【0073】

該アミノ基の置換基としては、

(1) 置換されていてもよいアルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチ

ル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級( $C_{1-6}$ )アルキルなどが挙げられる)；

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル(例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シアノオクチルなどの $C_{3-8}$ シクロアルキルなどが挙げられる)；

(2-1) 該シクロアルキルは、硫黄原子、酸素原子および窒素原子から選ばれるヘテロ原子を1個含有し、オキシラン、チオラン、アジリジン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ピロリジン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピラン、テトラヒドロチオピラン 1-オキシド、ピペリジンなど(好ましくは、6員環のテトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピラン、ピペリジンなど)を形成していてもよく、アミノ基との結合位置は3位または4位(好ましくは、4位)が好ましい；

(2-2) また、該シクロアルキルは、ベンゼン環と縮合し、インダン(例、インダン-1-イル、インダン-2-イルなど)、テトラヒドロナフタレン(例、テトラヒドロナフタレン-5-イル、テトラヒドロナフタレン-6-イルなど)など(好ましくは、インダンなど)を形成していてもよく；

(2-3) さらに、該シクロアルキルは、炭素数1~2の直鎖状の原子鎖を介して架橋し、ビスクロ[2. 2. 1]ヘプチル、ビスクロ[2. 2. 2]オクチル、ビスクロ[3. 2. 1]オクチル、ビスクロ[3. 2. 2]ノニルなど(好ましくは、炭素数1~2の直鎖状の原子鎖を介した架橋を有するシクロヘキシルなど、さらに好ましくは、ビスクロ[2. 2. 1]ヘプチルなど)の架橋環式炭化水素残基を形成していてもよい；

(3) 置換されていてもよいアルケニル(例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2~10のアルケニル、好ましくは低級( $C_{2-6}$ )アルケニルなどが挙げられる)；

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル(例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3~7のシクロアルケニルなどが挙げられる)；

(5) 置換されていてもよいアラルキル（例えば、フェニル-C<sub>1-4</sub> アルキル（例、ベンジル、フェネチルなど）などが挙げられる）；

(6) ホルミルまたは置換されていてもよいアシル（例えば、炭素数 2～4 のアルカノイル（例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど）、炭素数 1～4 のアルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）、炭素数 1～4 のアルコキシカルボニル（例、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、tert-ブトキシカルボニルなど）、炭素数 7～10 のアラルキルオキシカルボニル（例、ベンジルオキシカルボニルなど）などが挙げられる）；

(7) 置換されていてもよいアリアル（例えば、フェニル、ナフチルなど）；

(8) 置換されていてもよい複素環基（例えば、フラン、チオフェン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた 1～2 種のヘテロ原子 1～4 個を含有する 5～6 員の芳香族複素環から水素原子 1 個を除いて形成される基、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピランなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた 1～2 種のヘテロ原子 1～4 個を含有する 5～6 員の非芳香族複素環から水素原子 1 個を除いて形成される基など；好ましくは、5～6 員の非芳香族複素環から水素原子 1 個を除いて形成される基など；さらに好ましくは、テトラヒドロフラン、ピペリジン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピランなどの 1 個のヘテロ原子を含有する 5～6 員の非芳香族複素環から水素原子 1 個を除いて形成される基など）などの置換基が挙げられる。また、該アミノ基の置換基同士が結合して、ピペリジン、ピペラジン、モルホリン、チオモルホリンなどの 5～7 員の環状アミノを形成していてもよい。

【0074】

上記した(1)置換されていてもよいアルキル、(2)置換されていてもよいシクロアルキル、(3)置換されていてもよいアルケニル、(4)置換されていてもよいシクロアルケニル、(5)置換されていてもよいアラルキル、(6)置換されていてもよいアシル、(7)置換されていてもよいアリール、および(8)置換されていてもよい複素環基が有していてもよい置換基としては、ハロゲン(例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルキル、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、 $C_{1-4}$ アルキレンジオキシ(例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$ など)、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)、フェニル-低級( $C_{1-4}$ )アルキル、 $C_{3-7}$ シクロアルキル、シアノ、ニトロ、水酸基、置換されていてもよいチオール基(例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど)、低級( $C_{1-4}$ )アルコキシ-カルボニル、低級( $C_{7-10}$ )アラルキルオキシ-カルボニル、オキソ基(好ましくは、ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルキル、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルコキシ、フェニル-低級( $C_{1-4}$ )アルキル、 $C_{3-7}$ シクロアルキル、シアノ、水酸基など)などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

上記式(e I)中、 $R^{e2}$ で示される「置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよいアミノ基」は、好ましくは(1)ハロゲン、シアノ、水酸基または $C_{3-7}$ シクロアルキルを1~3個有していてもよい直鎖または分枝状の低級( $C_{1-6}$ )アルキル；

(2) ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキルまたはフェニル-低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキルを1~3個有していてもよく、硫黄原子、酸素原子および窒素原子から選ばれるヘテロ原子を1個含有していてもよく、ベンゼン環と縮合していてもよく、炭素数1~2の直鎖状の原子鎖を介して架橋していてもよい  $C_{5-8}$  シクロアルキル (例、それぞれ置換されていてもよいシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、テトラヒドロピラニル、テトラヒドロチアピラニル、ピペリジニル、インダニル、テトラヒドロナフタレニル、ビシクロ [2, 2, 1] ヘプチルなど) ;

(3) ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキルまたはハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシを1~3個有していてもよいフェニル-低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル ;

(4) ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキルまたはハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシを1~3個有していてもよいフェニル ; および

(5) ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ-低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ、フェニル-低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、シアノまたは水酸基を1~3個有していてもよい5~6員の芳香族複素環基 (例、フラン、チオフェン、ピロール、ピリジンなどから水素原子1個を除いて形成される基) から選ばれる置換基を1~3個有していてもよいアミノ基である。

#### 【0075】

上記式 (e I) 中、「置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよい含窒素複素環基」の「含窒素複素環」としては、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの1個の窒素原子の他に窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1~2種のヘテロ原子1~3個を含有していてもよい5~6員の芳香



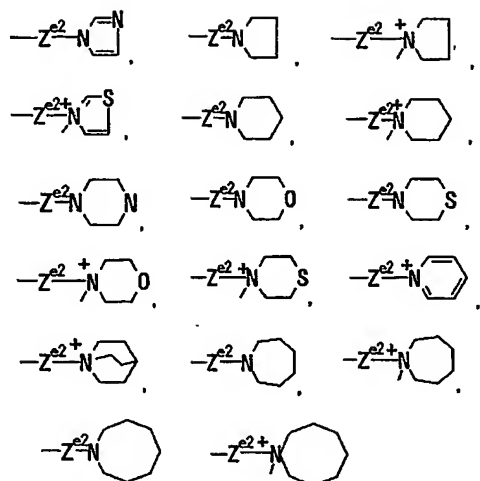
族複素環、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、アザシクロヘプタン、アザシクロオクタン（アゾカン）などの1個の窒素原子の他に窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～3個を含有していてもよい5～8員の非芳香族複素環などが挙げられ、これらの含窒素複素環は、炭素数1～2の直鎖状の原子鎖を介して架橋し、アザビシクロ[2. 2. 1]ヘプタン、アザビシクロ[2. 2. 2]オクタン（キヌクリジン）など（好ましくは、炭素数1～2の直鎖状の原子鎖を介した架橋を有するピペリジンなど）の架橋環式含窒素複素環を形成していてもよい。

上記した含窒素複素環の具体例のなかでも、ピリジン、イミダゾール、ピロリジン、ピペリジン、ピペラジン、モルホリン、チオモルホリン、アザビシクロ[2. 2. 2]オクタン（好ましくは、6員環）が好ましい。

該「含窒素複素環」の窒素原子は、4級アンモニウム化されていてもよく、あるいは酸化されていてもよい。該「含窒素複素環」の窒素原子が4級アンモニウム化されている場合、「窒素原子が4級アンモニウム化されている含窒素複素環基」のカウンター・アニオンとしては、ハロゲン原子の陰イオン（例、 $\text{Cl}^-$ 、 $\text{Br}^-$ 、 $\text{I}^-$ など）などの他に、塩酸、臭化水素酸、硝酸、硫酸、リン酸などの無機酸から誘導される陰イオン、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、フマル酸、シュウ酸、酒石酸、マレイン酸、クエン酸、コハク酸、リンゴ酸、メタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸などの有機酸から誘導される陰イオン、アスパラギン酸、グルタミン酸などの酸性アミノ酸から誘導される陰イオンなどが挙げられるが、なかでも、 $\text{Cl}^-$ 、 $\text{Br}^-$ 、 $\text{I}^-$ などが好ましい。

該「含窒素複素環基」は、炭素原子または窒素原子のいずれを介して $\text{Z}^{\text{e}2}$ で示される二価の基に結合していてもよく、2-ピリジル、3-ピリジル、2-ピペリジニルなどのように環構成炭素原子上で結合していてもよいが、

## 【化 26】



などのように環構成窒素原子上で結合するのが好ましい。

## 【0076】

該「含窒素複素環」が有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、置換されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、置換されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ、置換されていてもよいフェニル、置換されていてもよいモノまたはジフェニル—低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、置換されていてもよい $C_{3-7}$ シクロアルキル、シアノ、ニトロ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ—カルボニル、ホルミル、低級（ $C_{2-4}$ ）アルカノイル、低級（ $C_{1-4}$ ）アルキルスルホニル、置換されていてもよい複素環基（例えば、フラン、チオフエン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の芳香族複

素環から水素原子1個を除いて形成される基、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピランなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の非芳香族複素環から水素原子1個を除いて形成される基などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。また、該「含窒素複素環」の窒素原子は酸化されていてもよい。

該「含窒素複素環」が有していてもよい置換基としての「置換されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル」、「置換されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ」、「置換されていてもよいフェニル」、「置換されていてもよいモノまたはジフェニル-低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル」、「置換されていてもよい  $C_{3-7}$  シクロアルキル」および「置換されていてもよい複素環基」がそれぞれ有していてもよい置換基としては、例えば、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ハロゲン化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、低級 ( $C_{3-10}$ ) シクロアルキル、低級 ( $C_{3-10}$ ) シクロアルケニル、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）、 $C_{1-3}$  アルキレンジオキシ（例、メチレンジオキシ、エチレンジオキシなど）、シアノ、ニトロ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど）、低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ-

カルボニルなどが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

【0077】

上記式 (e I) 中、「置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよい含窒素複素環基」の「含窒素複素環」が有していてもよい置換基としては、(1) ハロゲン、(2) シアノ、(3) 水酸基、(4) カルボキシル基、(5) 低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシカルボニル、(6) ハロゲン、水酸基または低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシで置換されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、(7) ハロゲン、水酸基または低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシで置換されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ、(8) ハロゲン、低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、水酸基、低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシまたは  $C_{1-3}$  アルキレンジオキシで置換されていてもよいフェニル、(9) ハロゲン、低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、水酸基、低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシまたは  $C_{1-3}$  アルキレンジオキシで置換されていてもよいモノまたはジフェニル-低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、(10) フラン、チオフエン、ピロール、ピリジンなどの5～6員の芳香族複素環から水素原子1個を除いて形成される基などが好ましい。

上記式 (e I) 中、 $R^{e2}$  で示される「硫黄原子を介して結合する基」としては、式  $-S(O)_{em}-R^{eS}$  (式中、 $em$  は0～2の整数を示し、 $R^{eS}$  は置換基を示す) で表される基が挙げられる。上記式中、 $R^{eS}$  で示される置換基としては、例えば

(1) 置換されていてもよいアルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルなどが挙げられる) ；

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキルなどが挙げられる) ；

(3) 置換されていてもよいアラルキル (例えば、フェニル- $C_{1-4}$  アルキル

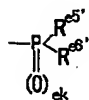
(例、ベンジル、フェネチルなど) などが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいアリール (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などが好ましく、上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアラルキル、および (4) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基 (例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

【0078】

上記式 (e I) 中、 $R^{e2}$  で示される「式：

【化27】



(式中、 $e_k$  は0または1を示し、 $e_k$  が0の時、燐原子はホスホニウム塩を形成していてもよく、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  はそれぞれ置換されていてもよい炭化水素基、置換されていてもよい水酸基または置換されていてもよいアミノ基 (好ましくは、置換されていてもよい炭化水素基または置換されていてもよいアミノ基；さらに好ましくは、置換されていてもよい炭化水素基) を示し、 $R^{e5}$  お

よび  $R^{e6}$  は互いに結合して隣接する隣原子とともに環状基を形成していてもよい) で表される基」において、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  で示される置換されていてもよい炭化水素基における「炭化水素基」としては、

(1) 置換されていてもよいアルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルなどが挙げられる) ;

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキルなどが挙げられる) ;

(3) 置換されていてもよいアルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなどの炭素数2~10のアルケニル、好ましくは低級 ( $C_{2-6}$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3~7のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(5) 置換されていてもよいアルキニル (例えば、エチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ペンチニル、3-ヘキシニルなどの炭素数2~10のアルキニル、好ましくは低級 ( $C_{2-6}$ ) アルキニルなどが挙げられる) ;

(6) 置換されていてもよいアラルキル (例えば、フェニル- $C_{1-4}$  アルキル (例、ベンジル、フェネチルなど) などが挙げられる) ;

(7) 置換されていてもよいアリール (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などが挙げられ、上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアルケニル、(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル、(5) 置換されていてもよいアルキニル、(6) 置換されていてもよいアラルキル、および (7) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ

素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基(例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル(例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

## 【0079】

$R^{e5}$ 、および $R^{e6}$ で示される「置換されていてもよい水酸基」としては、例えば、(1)置換されていてもよいアルキル(例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級( $C_{1-6}$ )アルキルなどが挙げられる)；

(2)置換されていてもよいシクロアルキル(例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$ シクロアルキルなどが挙げられる)；

(3)置換されていてもよいアルケニル(例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2~10のアルケニル、好ましくは低級( $C_{2-6}$ )アルケニルなどが挙げられる)；

(4)置換されていてもよいシクロアルケニル(例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニル

メチルなど炭素数3～7のシクロアルケニルなどが挙げられる)；

(5) 置換されていてもよいアラルキル (例えば、フェニル-C<sub>1-4</sub>アルキル (例、ベンジル、フェネチルなど) などが挙げられる)；

(6) ホルミルまたは置換されていてもよいアシル (例えば、炭素数2～4のアルカノイル (例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど)、炭素数1～4のアルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられる)；

(7) 置換されていてもよいアリアル (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などを有していてもよい水酸基などが挙げられる。

上記した(1)置換されていてもよいアルキル、(2)置換されていてもよいシクロアルキル、(3)置換されていてもよいアルケニル、(4)置換されていてもよいシクロアルケニル、(5)置換されていてもよいアラルキル、(6)置換されていてもよいアシル、および(7)置換されていてもよいアリアルが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、C<sub>1-4</sub>アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノC<sub>1-4</sub>アルキルアミノ、ジC<sub>1-4</sub>アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基 (例、カルボキシル、C<sub>1-4</sub>アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノC<sub>1-4</sub>アルキルカルバモイル、ジC<sub>1-4</sub>アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよいC<sub>1-4</sub>アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよいC<sub>1-4</sub>アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、C<sub>2-4</sub>アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、C<sub>1-4</sub>アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

【0080】

また、上記式中、R<sup>e5</sup>、およびR<sup>e6</sup>は互いに結合して隣接する隣原子とと



もに環状基（好ましくは、5～7員環）を形成していてもよい。かかる環状基は、置換基を有していてもよく、当該置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル（例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

上記式（e I）中、磷原子がホスホニウム塩を形成する場合のカウンター・アニオンとしては、ハロゲン原子の陰イオン（例、 $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$ など）などの他に、塩酸、臭化水素酸、硝酸、硫酸、リン酸などの無機酸から誘導される陰イオン、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、フマル酸、シュウ酸、酒石酸、マレイン酸、クエン酸、コハク酸、リンゴ酸、メタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸などの有機酸から誘導される陰イオン、アスパラギン酸、グルタミン酸などの酸性アミノ酸から誘導される陰イオンなどが挙げられるが、なかでも、 $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$ などが好ましい。

$R^{e5}$ 、および $R^{e6}$ で示される置換されていてもよいアミノ基としては、

（1）置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級（ $C_{1-6}$ ）アルキルなどが挙

げられる) ;

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_3 - 7$  シクロアルキルなどが挙げられる) ;

(3) 置換されていてもよいアルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2~10のアルケニル、好ましくは低級 ( $C_2 - 6$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3~7のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(5) ホルミルまたは置換されていてもよいアシル (例えば、炭素数2~4のアルカノイル (例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど)、炭素数1~4のアルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられる) ;

(6) 置換されていてもよいアリール (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などを1~2個有していてもよいアミノ基などが挙げられる。

#### 【0081】

上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアルケニル、(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル、(5) 置換されていてもよいアシル、および (6) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_1 - 4$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_1 - 4$  アルキルアミノ、ジ  $C_1 - 4$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシ基 (例、カルボキシル、 $C_1 - 4$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_1 - 4$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_1 - 4$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよ

い  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3 個が好ましい。

$R^{e2}$  で示される「置換されていてもよいアミノ基」および「置換されていてもよいグアニジノ基」における置換基としては、上記した  $R^{e2}$  で示される「置換されていてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよいアミノ基」における置換基と同様なものが挙げられる

$R^{e2}$  としては、(1) 置換されていてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよいアミノ基、(2) 置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化またはオキシド化されていてもよい含窒素複素環基、(3) 置換されていてもよいアミノ基または (4) 置換されていてもよいグアニジノ基であることが好ましく、 $R^{e2}$  としては、置換されていてもよく、窒素原子が 4 級アンモニウム化されていてもよいアミノ基などがさらに好ましい。また、 $R^{e2}$  は置換されていてもよいアミノ基または置換されていてもよいグアニジノ基であってもよい。

$R^{e2}$  としては、式  $-NR^eR^{e'}$  または  $-N^+R^eR^{e'}R^{e''}$  で表される基 (式中、 $R^e$ 、 $R^{e'}$  および  $R^{e''}$  はそれぞれ置換されていてもよい脂肪族炭化水素基 (脂肪族鎖式炭化水素基および脂肪族環式炭化水素基) または置換されていてもよい脂環式 (非芳香族) 複素環基を示す) がさらに好ましい。

#### 【0082】

上記式中、 $R^e$ 、 $R^{e'}$  および  $R^{e''}$  で示される「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基」および「置換されていてもよい脂環式複素環基」としては、置換基  $R^{e2}$  で示される「置換されていてもよいアミノ基」が有していてもよい置換基として例示された「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基 (例、それぞれ置換されていてもよいアルキル、シクロアルキル、アルケニル、シクロアルケニル

など)」および「置換されていてもよい脂環式複素環基（例、置換されていてもよい5～6員の非芳香族複素環など）」と同様なものが挙げられる。

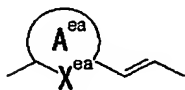
なかでも、 $R^e$  および  $R^{e'}$  としては、置換されていてもよい鎖状炭化水素基（例、それぞれ置換されていてもよいアルキル、アルケニルなど）が好ましく、置換されていてもよい  $C_{1-6}$  アルキル基がさらに好ましく、置換されていてもよいメチル基がとりわけ好ましい。

$R^{e''}$  としては、置換されていてもよい脂環式炭化水素基（好ましくは、置換されていてもよい  $C_{3-8}$  シクロアルキル基；さらに好ましくは置換されていてもよいシクロヘキシル）または置換されていてもよい脂環式複素環基（好ましくは、置換されていてもよい飽和の脂環式複素環基（好ましくは6員環基）；さらに好ましくは、置換されていてもよいテトラヒドロピラニル、置換されていてもよいテトラヒドロチオピラニルまたは置換されていてもよいピペリジル；とりわけ好ましくは、置換されていてもよいテトラヒドロピラニル）が好ましい。

上記式 (e Ia) 中、 $R^{e1}$ 、 $Z^{e2}$  は前記と同意義である。

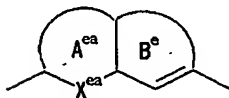
上記式 (e Ia) 中、 $W^{ea}$  で示される

【化28】



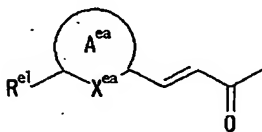
で表される基および

【化29】



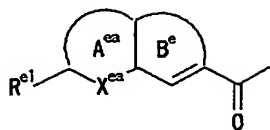
で表される基は、それぞれ

【化30】



および

## 【化 3 1】



のような様式で隣接する基と結合していることを示す。

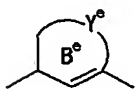
## 【0083】

上記式中、 $A^{e a}$  で示される「置換されていてもよい5～6員芳香環」の「5～6員芳香環」としては、ベンゼンなどの6員の芳香族炭化水素、フラン、チオフェン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～3個を含有する5～6員の芳香族複素環などが挙げられるが、なかでもベンゼン、フラン、チオフェン、ピリジン（好ましくは、6員環）などが好ましく、とりわけベンゼンが好ましい。

$A^{e a}$  で示される「置換されていてもよい5～6員芳香環」の「5～6員芳香環」が有していてもよい「置換基」としては、 $R^{e 1}$  で示される「置換されていてもよい5～6員環」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様なものが挙げられる。また、かかる  $A^{e a}$  の置換基は、1～4個（好ましくは、1～2個）同一または異なって環のいずれの位置に置換していてもよく、 $X^{e a}$  で示される位置あるいはその他の位置の何れであっても、置換可能な位置であればいずれの位置に置換基を有していてもよい。

上記式中、 $B^e$  で示される「置換されていてもよい5～7員環」の「5～7員環」としては、例えば  
式：

## 【化 3 2】

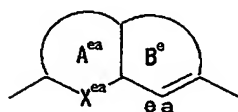


で表される骨格を有し、置換可能な任意の位置に置換基を有していてもよい5～7員環などが挙げられる。

上記式中、 $Y^e$  は前記と同意義である。

また、かかる  $A^{ea}$  の置換基は、1～4個（好ましくは、1～2個）同一または異なって環のいずれの位置に置換していてもよいが、 $W^{ea}$  で示される

【化33】



で表される基において、 $e_a$  の位置の炭素原子は無置換であることが好ましい。

上記式 (e I a) 中、 $R^{e2a}$  で示される「置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよいアミノ基」としては  $R^{e2}$  で示される「置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよいアミノ基」と同様なものが挙げられる。

上記式 (e I a) 中、 $R^{e2a}$  で示される「式：

【化34】



（式中、 $e_k$  は0または1を示し、 $e_k$  が0の時、磷原子はホスホニウム塩を形成していてもよく、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  はそれぞれ置換されていてもよい炭化水素基または置換されていてもよいアミノ基を示し、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  は互いに結合して隣接する磷原子とともに環状基を形成していてもよい）で表される基」において、 $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  で示される「置換されていてもよい炭化水素基」、「置換されていてもよいアミノ基」および  $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  が互いに結合して隣接する磷原子とともに環状基を形成する場合の環状基としては、前記  $R^{e5}$  および  $R^{e6}$  で示されるそれらの例示と同様なものがあげられる。

【0084】

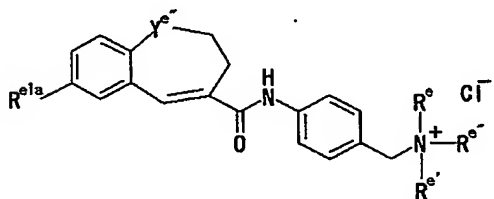
上記式中、磷原子がホスホニウム塩を形成する場合のカウンター・アニオンとしては、ハロゲン原子の陰イオン（例、 $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$  など）などの他に、塩酸、臭化水素酸、硝酸、硫酸、リン酸などの無機酸から誘導される陰イオン、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、フマル酸、シュウ酸、酒石酸、マレイン酸、クエン酸、コハク酸、リンゴ酸、メタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-ト

ルエンスルホン酸などの有機酸から誘導される陰イオン、アスパラギン酸、グルタミン酸などの酸性アミノ酸から誘導される陰イオンなどが挙げられるが、なかでも、 $\text{Cl}^-$ 、 $\text{Br}^-$ 、 $\text{I}^-$ などが好ましい。

$\text{R}^{\text{e}2\text{a}}$ としては、(1)置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよいアミノ基が好ましく、式 $-\text{N}^+\text{R}^{\text{e}}\text{R}^{\text{e}'}\text{R}^{\text{e}''}$ で表される基(式中、 $\text{R}^{\text{e}}$ 、 $\text{R}^{\text{e}'}$  および  $\text{R}^{\text{e}''}$  はそれぞれ置換されていてもよい脂肪族炭化水素基または置換されていてもよい脂環式複素環基を示す)がさらに好ましい。

式(e Ia)で表される化合物としては、式：

【化35】



[式中、 $\text{R}^{\text{e}1\text{a}}$ は置換されていてもよいフェニル基または置換されていてもよいチエニル基を示し、 $\text{Y}^{\text{e}}$ は $-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-$ または $-\text{S}-$ を示し、 $\text{R}^{\text{e}}$ 、 $\text{R}^{\text{e}'}$  および  $\text{R}^{\text{e}''}$  はそれぞれ置換されていてもよい脂肪族炭化水素基または置換されていてもよい脂環式複素環基を示す]で表される化合物が好ましい。

上記式中、 $\text{R}^{\text{e}1\text{a}}$ で示される「置換されていてもよいフェニル基」および「置換されていてもよいチエニル基」の「フェニル基」および「チエニル基」がそれぞれ有していてもよい「置換基」としては、前記 $\text{R}^{\text{e}1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環基」における置換基と同様なものが挙げられる。

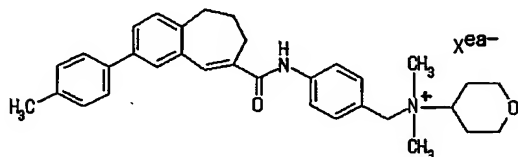
上記式中、 $\text{R}^{\text{e}}$ 、 $\text{R}^{\text{e}'}$  および  $\text{R}^{\text{e}''}$  で示される「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基」および「置換されていてもよい脂環式複素環基」としては、置換基 $\text{R}^{\text{e}2\text{a}}$ で示される「置換されていてもよいアミノ基」が有していてもよい置換基として例示された「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基」および「置換されていてもよい脂環式複素環基」と同様なものが挙げられる。

なかでも、 $\text{R}^{\text{e}}$  および  $\text{R}^{\text{e}'}$  としては、置換されていてもよい鎖状炭化水素基が好ましく、置換されていてもよい $\text{C}_{1-6}$ アルキル基がさらに好ましく、置換

されていてもよいメチル基がとりわけ好ましい。

$R^{e-}$  としては、置換されていてもよい脂環式炭化水素基（好ましくは、置換されていてもよい  $C_3 - 8$  シクロアルキル基；さらに好ましくは置換されていてもよいシクロヘキシル）または置換されていてもよい脂環式複素環基（好ましくは、置換されていてもよい飽和の脂環式複素環基（好ましくは6員環基）；さらに好ましくは、置換されていてもよいテトラヒドロピラニル、置換されていてもよいテトラヒドロチオピラニルまたは置換されていてもよいピペリジル；とりわけ好ましくは、置換されていてもよいテトラヒドロピラニル）および式：

【化36】



（式中、 $X^{e a-}$  はアニオンを示す）で表される化合物が好ましい。

【0085】

上記式中、 $X^{e a-}$  で示されるアニオンとしては、例えば、ハロゲン原子の陰イオン；塩酸、臭化水素酸、硝酸、硫酸、リン酸などの無機酸から誘導される陰イオン、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、フマル酸、シュウ酸、酒石酸、マレイン酸、クエン酸、コハク酸、リンゴ酸、メタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸などの有機酸から誘導される陰イオン；アスパラギン酸、グルタミン酸などの酸性アミノ酸から誘導される陰イオン；などが挙げられるが、なかでも、ハロゲン原子の陰イオンが好ましい。

上記式 (e I b) 中、 $R^{e 1 b}$  で示される「置換されていてもよいフェニル基」および「置換されていてもよいチエニル基」の「フェニル基」および「チエニル基」がそれぞれ有していてもよい「置換基」としては、前記  $R^{e 1}$  で示される「置換されていてもよい5～6員環基」における置換基と同様なものが挙げられる。

上記式 (e I b) 中、 $Y^{e b}$  は  $-CH_2-$ 、 $-O-$  または  $-S-$  を示し、 $Y^{e b}$  としては  $-CH_2-$  または  $-O-$  が好ましい。

上記式 (e I b) 中、 $R^{e 2 b}$ 、 $R^{e 3 b}$  および  $R^{e 4 b}$  はそれぞれ「置換さ



れていてもよい脂肪族炭化水素基」または「置換されていてもよい脂環式複素環基」を示し、 $R^{e2b}$ 、 $R^{e3b}$  および  $R^{e4b}$  で示される「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基」の「脂肪族炭化水素基」としては、

(1) 置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは  $C_{1-6}$  アルキルなどが挙げられる）；

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル（例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどの  $C_{3-8}$  シクロアルキルなどが挙げられる）；

(3) 置換されていてもよいアルケニル（例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2～10のアルケニル、好ましくは  $C_{2-6}$  アルケニルなどが挙げられる）；

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル（例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3～7のシクロアルケニルなどが挙げられる）；

などが挙げられる。

$R^{e2b}$ 、 $R^{e3b}$  および  $R^{e4b}$  で示される「置換されていてもよい脂環式複素環基」の「脂環式複素環基」としては、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピランなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の非芳香族複素環から水素原子1個を除いて形成される基など；好ましくは、テトラヒドロフラン、ピペリジン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピランなどの1個のヘテロ原子を含有する飽和の5～6員複素環から水素原子1個を除いて形成される基などが挙げられる。

【0086】

$R^{e2b}$ ,  $R^{e3b}$  および  $R^{e4b}$  で示される「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基」および「置換されていてもよい脂環式複素環基」の「脂肪族炭化水素基」および「脂環式複素環基」がそれぞれ有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、 $C_{2-4}$  アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）、フェニル、フェニル- $C_{1-4}$  アルキル、 $C_{3-7}$  シクロアルキル、シアノ、ニトロ、オキソ、ヒドロキシ、メルカプト、アミノ、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシーカルボニル（好ましくは、ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ、フェニル- $C_{1-4}$  アルキル、 $C_{3-7}$  シクロアルキル、シアノ、オキソ、ヒドロキシなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

上記式 (e I b) 中、 $R^{e2b}$  および  $R^{e3b}$  としては、同一または異なって置換されていてもよい鎖状炭化水素基が好ましく、なかでも置換されていてもよいアルキル基が好ましく、とりわけ  $R^{e2b}$  および  $R^{e3b}$  が同一であることが好ましく、 $R^{e2b}$  および  $R^{e3b}$  が共にメチル基であることが最も好ましい。

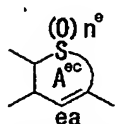
上記式 (e I b) 中、 $R^{e4b}$  としては、置換されていてもよい脂環式炭化水素基または置換されていてもよい脂環式複素環基が好ましく、なかでも置換されていてもよいシクロアルキル基または置換されていてもよい飽和の脂環式複素環基が好ましく、とりわけ置換されていてもよいシクロヘキシル基または置換されていてもよい6員の飽和の脂環式複素環基が好ましく、それぞれ置換されていてもよいシクロアルキル、テトラヒドロピラニル、テトラヒドロチオピラニルおよびピペリジルが最も好ましく用いられる。

上記式 (e I c) 中、 $R^{e1}$  は前記と同意義である。

上記式 (e I c) 中、 $A^{ec}$  で示される「置換されていてもよい6～7員環」の「6～7員環」が有していてもよい「置換基」としては、 $R^{e1}$  で示される「置

換されていてもよい5～6員環」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様なものが挙げられる。また、かかる $A^{e\ c}$ の置換基は、1～3個（好ましくは、1～2個）同一または異なって環のいずれの位置に置換していてもよいが、式：

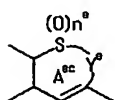
## 【化37】



で表される基において、eaの位置の炭素原子は無置換であることが好ましい。

$A^{e\ c}$ で示される「置換されていてもよい6～7員環」としては、例えば式：

## 【化38】



で表される骨格を有し、置換可能な任意の位置に置換基を有していてもよい6～7員環などが挙げられる。

## 【0087】

上記式中、 $Y^e$ は前記と同意義である。

$B^{e\ c}$ で示される「置換されていてもベンゼン環」の「ベンゼン環」が有していてもよい「置換基」としては、 $R^{e\ 1}$ で示される「置換されていてもよい5～6員環」の「5～6員環」が有していてもよい「置換基」と同様なものなどが挙げられるが、なかでもハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル（例、トリフルオロメチル

、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)などが好ましく、とりわけハロゲン、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシが好ましく、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

上記式(e I c)中、 $e_n$ は1または2(好ましくは2)を示す。

上記式(e I c)中、 $Z^{e2}$ で示される2価の基は前記と同意義である。

上記式(e I c)中、 $R^{e2c}$ で示される(1)置換されていてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよいアミノ基、(2)置換されていてもよく、環構成原子として硫黄原子または酸素原子を含有していてもよく、窒素原子が4級アンモニウム化されていてもよい含窒素複素環基、(3)硫黄原子を介して結合する基または(4)式:

【化39】



(式中、各記号は前記と同意義である)で表される基は前記 $R^{e2}$ で示されるそれらの例と同様である。

【0088】

上記式(e I d)中、 $R^{e1d}$ で示される「式 $R^{ed}-Z^{e1d}-X^{ed}-Z^{e2d}-$ (式中、 $R^{ed}$ は水素原子または置換されていてもよい炭化水素基を示し、 $X^{ed}$ は置換されていてもよいアルキレン鎖を示し、 $Z^{e1d}$ および $Z^{e2d}$ はそれぞれヘテロ原子を示す。)で表される置換基を有し、さらに置換基を有していてもよい5~6員芳香環」の「5~6員芳香環」としては、ベンゼンなどの6員の芳香族炭化水素、フラン、チオフェン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1~2種のヘテロ原子1~4個を

含有する5～6員の芳香族複素環、などが挙げられるが、なかでもベンゼン、フラン、チオフェン、ピリジンなどが好ましく、ベンゼン、フランまたはチオフェンがより好ましく、とりわけベンゼンが好ましい。

R<sup>ed</sup>で示される「置換されていてもよい炭化水素基」の「炭化水素基」としては、例えば、

(1) アルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどのC<sub>1</sub> - 10 アルキル、好ましくは低級 (C<sub>1</sub> - 6) アルキル、さらに好ましくは低級 (C<sub>1</sub> - 4) アルキルなどが挙げられる) ;

(2) シクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどのC<sub>3</sub> - 7 シクロアルキルなどが挙げられる) ;

(3) アルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなどの炭素数2～10のアルケニル、好ましくは低級 (C<sub>2</sub> - 6) アルケニルなどが挙げられる) ;

(4) シクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3～7のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(5) アルキニル (例えば、エチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ペンチニル、3-ヘキシニルなどの炭素数2～10のアルキニル、好ましくは低級 (C<sub>2</sub> - 6) アルキニルなどが挙げられる) ;

(6) アラルキル (例えば、フェニル-C<sub>1</sub> - 4 アルキル (例、ベンジル、フェネチルなど) などが挙げられる) ;

(7) アリール (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) ;

(8) シクロアルキル-アルキル (例えば、シクロプロピルメチル、シクロブチルメチル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチル、シクロヘプチルメチルなどのC<sub>3</sub> - 7 シクロアルキル-C<sub>1</sub> - 4 アルキルなどが挙げられる) ;

などが挙げられ、上記した(1) アルキル、(2) シクロアルキル、(3) アル

ケニル、(4) シクロアルケニル、(5) アルキニル、(6) アラルキル、(7) アリールおよび(8) シクロアルキル-アルキルが有していてもよい置換基としては、ハロゲン(例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基(例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルキル(例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、 $C_{1-4}$  アルキレンジオキシ(例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$ など)、置換されていてもよいスルホンアミド〔例、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)が $-SO_2-$ に結合して形成される基など〕、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)、置換されていてもよい複素環基などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

#### 【0089】

ここで、 $R^{ed}$ で示される「置換されていてもよい炭化水素基」の置換基としての「置換されていてもよい複素環基」における「複素環基」としては、芳香族複素環または非芳香族複素環から1個の水素原子を取り除いて形成される基などが挙げられる。該芳香族複素環としては、例えば、フラン、チオフエン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン

、トリアゾール、オキサジアゾール、チアジアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の芳香族複素環などが挙げられ、該非芳香族複素環としては、例えば、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジオキサラン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピランなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の非芳香族複素環および前記芳香族複素環の一部または全部の結合が飽和の結合である非芳香族複素環など（好ましくは、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、テトラゾールなどの芳香族複素環）が挙げられる。

$R^{ed}$ で示される「置換されていてもよい炭化水素基」の置換基としての「置換されていてもよい複素環基」における「複素環基」は、置換可能な任意の位置に1～3個の置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、例えば、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル（例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、 $C_{1-4}$ アルキレンジオキシ（例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$ など）、置換されていてもよいスルホンアミド〔例、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホ

リン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど) が $-SO_2-$ に結合して形成される基など]、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) など(好ましくは、 $C_{1-4}$ アルキルなど)が挙げられる。

# 【0090】

また、式  $R^{ed}-Z^{ed}-X^{ed}-Z^{ed}-$  (式中、各記号は前記と同意義を示す。) で表される基が1価の基である(5～6員芳香環と結合して環を形成しない) 場合、 $R^{ed}$ としては、置換されていてもよいアルキル基が好ましく、ハロゲン化されていてもよい低級アルキル基がより好ましく、とりわけ、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル基が好ましい。

上記式(e I d) 中、 $X^{ed}$ で示される「置換されていてもよいアルキレン鎖」としては、例えば、置換基を有していてもよく、直鎖状または分枝状であってもよい $C_{1-6}$ アルキレンなどが挙げられるが、該アルキレン鎖における直鎖部分の炭素原子数は1ないし4個であることが好ましく、とりわけ、 $X^{ed}$ としては、置換されていてもよい直鎖状の $C_{1-4}$ アルキレン(好ましくはエチレンまたはプロピレン)が好ましい。

$X^{ed}$ で示される「置換されていてもよいアルキレン鎖」における「アルキレン鎖」が有していてもよい置換基としては、直鎖部分を構成する2価の鎖に結合可能なものであればいずれでもよいが、例えば、炭素数1～6の低級アルキル(例、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシルなど)、低級( $C_{3-7}$ )シクロアルキル(例、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなど)、ホルミル、低級( $C_{2-7}$ )アルカノイル(例、アセチル、プロピオニル、ブチリルなど)、エステル化されていてもよいホスホノ基、エステル化されていてもよいカルボキシル基、水酸基、オキソなどが挙げられ、好ましくは、炭素数1～6の低級アルキル(好ましくは、 $C_{1-3}$ アルキル)、水酸基、オキソなどが挙げられる。

該エステル化されていてもよいホスホノ基としては、 $P(O)(OR^{ed7})(O$



$R^{e8d}$ ) [式中、 $R^{e7d}$  および  $R^{e8d}$  はそれぞれ水素、炭素数 1～6 のアルキル基または炭素数 3～7 のシクロアルキル基を示し、 $R^{e7d}$  および  $R^{e8d}$  は互いに結合して 5～7 員環を形成していてもよい] で表されるものが挙げられる。

上記式中、 $R^{e7d}$  および  $R^{e8d}$  で表される炭素数 1～6 のアルキル基としては、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシルなどが挙げられ、炭素数 3～7 のシクロアルキルとしては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどが挙げられるが、好ましくは、鎖状の炭素数 1～6 の低級アルキル、さらに好ましくは炭素数 1～3 の低級アルキルが挙げられる。 $R^{e7d}$  および  $R^{e8d}$  としては、同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。また、 $R^{e7d}$  および  $R^{e8d}$  は互いに結合して 5～7 員環を形成する場合、 $R^{e7d}$  と  $R^{e8d}$  とが互いに結合して、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_3-$ 、 $-(CH_2)_4-$  で表される直鎖状の  $C_{2-4}$  アルキレン側鎖を形成する。該側鎖は置換基を有していてもよく、例えばかかる置換基としては、水酸基、ハロゲンなどが挙げられる。

#### 【0091】

該エステル化されていてもよいカルボキシ基のエステル体としては、カルボキシ基と炭素数 1～6 のアルキル基または炭素数 3～7 のシクロアルキル基とが結合したもの、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、イソプロポキシカルボニル、ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニル、sec-ブトキシカルボニル、tert-ブトキシカルボニル、ペンチルオキシカルボニル、ヘキシルオキシカルボニル等が挙げられる。

$X^{ed}$  としては、置換されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキレン、なかでも  $C_{1-3}$  アルキル、水酸基またはオキソで置換されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキレンが好ましく、とりわけ、式  $-(CH_2)_{en}-$  ( $en$  は 1～4 の整数を示す) で表される基が好ましい。

$Z^{e1d}$  および  $Z^{e2d}$  で示されるヘテロ原子としては、例えば、 $-O-$ 、 $-$

$S(O)_{em}$  ( $em$ は0~2の整数を示す)、 $-N(R^{e4d})-$  ( $R^{e4d}$ は水素原子または置換されていてもよい低級アルキル基を示す) などが挙げられるが、 $Z^{e1d}$ としては $-O-$ または $-S(O)_{em}$  ( $em$ は0~2の整数を示す) が好ましく、 $-O-$ がより好ましい。また、 $Z^{e2d}$ としては、 $-O-$ または $-N(R^{e4d})-$  ( $R^{e4d}$ は水素原子または置換されていてもよい低級アルキル基を示す) が好ましく、 $-O-$ がより好ましい。

$R^{e4d}$ で示される置換されていてもよい低級アルキル基としては、 $R^{ed}$ で示される「置換されていてもよい炭化水素基」として例示された「置換されていてもよい低級アルキル基」と同様なものが挙げられる。

$R^{e1d}$ で示される「式  $R^{ed}-Z^{e1d}-X^{ed}-Z^{e2d}-$  (式中、各記号は前記と同意義を示す。) で表される置換基を有し、さらに置換基を有していてもよい5~6員芳香環」の「5~6員環」が、式  $R^{ed}-Z^{e1d}-X^{ed}-Z^{e2d}-$  で表される基以外に有していてもよい「置換基」としては、例えば、ハロゲン原子、ニトロ、シアノ、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよい水酸基、置換されていてもよいチオール基 (硫黄原子は酸化されていてもよく、置換されていてもよいスルフィニル基または置換されていてもよいスルホニル基を形成していてもよい)、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよいアシル基、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基、置換されていてもよい芳香族基などが用いられる。

$R^{e1d}$ の置換基としてのハロゲンの例としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが挙げられ、とりわけフッ素および塩素が好ましい。

$R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよいアルキルにおけるアルキルとしては、直鎖状または分枝状の炭素数1~10のアルキル、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルが挙げられる。該置換されていてもよいアルキルにおける置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸

基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルコキシ- $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、トリフルオロメトキシエトキシ、トリフルオロエトキシエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

## 【0092】

$R^{e1d}$  の置換基としての置換されていてもよいシクロアルキルにおけるシクロアルキルとしては、例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$  シクロアルキルなどが挙げられる。該置換されていてもよいシクロアルキルにおける置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルキル（例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど）、ハ

ロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

$R^{e1d}$  の置換基としての置換されていてもよい水酸基における置換基としては、(1) 置換されていてもよいアルキル (例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの  $C_{1-10}$  アルキル、好ましくは低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキルなどが挙げられる) ;

(2) 置換されていてもよく、ヘテロ原子を含有していてもよいシクロアルキル (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの  $C_{3-7}$  シクロアルキル ; テトラヒドロフランニル、テトラヒドロチエニル、ピロリジニル、ピラゾリジニル、ピペリジル、ピペラジニル、モルホリニル、チオモルホリニル、テトラヒドロピラニル、テトラヒドロチオピラニルなどの 1~2 個のヘテロ原子を含有する飽和の 5~6 員複素環基など (好ましくはテトラヒドロピラニルなど) ; などが挙げられる) ;

(3) 置換されていてもよいアルケニル (例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数 2~10 のアルケニル、好ましくは低級 ( $C_{2-6}$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数 3~7 のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(5) 置換されていてもよいアラルキル (例えば、フェニル- $C_{1-4}$  アルキル (例、ベンジル、フェネチルなど) などが挙げられる) ;

(6) ホルミルまたは置換されていてもよいアシル (例えば、炭素数 2~4 のアルカノイル (例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど)、炭素数 1~4 のアルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルな

ど)などが挙げられる) ;

(7) 置換されていてもよいアリール (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などの置換基が挙げられ、上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアルケニル、(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル、(5) 置換されていてもよいアラルキル、(6) 置換されていてもよいアシル、および (7) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシ基 (例、カルボキシ、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-6}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど ; 好ましくはハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)、置換されていてもよい5~6員の芳香族複素環 [例、フラン、チオフェン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、オキサゾール、イソチアゾール、イソキサゾール、テトラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアゾールなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1~2種のヘテロ原子1~4個を含有する5~6員の芳香族複素環など ; 該複素環が有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、チオール基、アミノ基、カルボキシ基、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されてい

てもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。】などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

### 【0093】

$R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよいチオール基における置換基としては、上記した「 $R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよい水酸基における置換基」と同様なものが挙げられるが、なかでも

(1) 置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級（ $C_{1-6}$ ）アルキルなどが挙げられる）；

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル（例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$ シクロアルキルなどが挙げられる）；

(3) 置換されていてもよいアラルキル（例えば、フェニル- $C_{1-4}$ アルキル（例、ベンジル、フェネチルなど）などが挙げられる）；

(4) 置換されていてもよいアリール（例えば、フェニル、ナフチルなど）などが好ましく、

上記した(1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアラルキル、および(4) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモ

ルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル(例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

$R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよいアミノ基の置換基としては、上記した「 $R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよい水酸基における置換基」と同様な置換基を1～2個有していてもよいアミノ基などが挙げられるが、なかでも(1)置換されていてもよいアルキル(例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級( $C_{1-6}$ )アルキルなどが挙げられる)；

(2)置換されていてもよいシクロアルキル(例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$ シクロアルキルなどが挙げられる)；

(3)置換されていてもよいアルケニル(例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2～10のアルケニル、好ましくは低級( $C_{2-6}$ )アルケニルなどが挙げられる)；

(4)置換されていてもよいシクロアルケニル(例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3～7のシクロアルケニルなどが挙げられる)；

(5)ホルミルまたは置換されていてもよいアシル(例えば、炭素数2～4のアルカノイル(例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリルなど)、炭

素数 1~4 のアルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられる) ;

(6) 置換されていてもよいアリアル (例えば、フェニル、ナフチルなどが挙げられる) などが好ましく、

上記した (1) 置換されていてもよいアルキル、(2) 置換されていてもよいシクロアルキル、(3) 置換されていてもよいアルケニル、(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル、(5) 置換されていてもよいアシル、および (6) 置換されていてもよいアリアルが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの 5~6 員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシ基 (例、カルボキシ、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3 個が好ましい。

#### 【0094】

また、 $R^{e1d}$  の置換基としての置換されていてもよいアミノ基は、アミノ基の置換基同士が結合して、環状のアミノ基 (例えば、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの 5~6 員の環状アミノなど) を形成していてもよい。該環状アミノ基は、置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオ



ール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシ基（例、カルボキシ、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル（例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

$R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよいアシル基としては、

- (1) 水素、
- (2) 置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級（ $C_{1-6}$ ）アルキルなどが挙げられる）；
- (3) 置換されていてもよいシクロアルキル（例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$ シクロアルキルなどが挙げられる）；
- (4) 置換されていてもよいアルケニル（例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2～10のアルケニル、好ましくは低級（ $C_{2-6}$ ）アルケニルなどが挙げられる）；
- (5) 置換されていてもよいシクロアルケニル（例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3～7のシクロアルケニルなどが挙げられる）；

(6) 置換されていてもよい5～6員の単環の芳香族基（例えば、フェニル、5～6員の芳香族複素環基（例えば、フリル、チエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、イソチアゾリル、イソキサゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピラジル、ピリミジニル、ピリダジニル、トリアゾリルなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の芳香族複素環基など；好ましくは、ピリジル、チエニルなど）などが挙げられる）；

(7) 置換されていてもよい5～6員の単環の非芳香族複素環基（例えば、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジオキサラン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピランなどの窒素原子、硫黄原子および酸素原子から選ばれた1～2種のヘテロ原子1～4個を含有する5～6員の単環の非芳香族複素環から1個の水素原子を取り除いて形成される基など；好ましくは、ジオキサラニルなどが挙げられる。）などがカルボニル基またはスルホニル基と結合したもの（例、アセチル、プロピオニル、ブチリル、イソブチリル、バレリル、イソバレリル、ピバロイル、ヘキサノイル、ヘプタノイル、オクタノイル、シクロブタンカルボニル、シクロペンタンカルボニル、シクロヘキサンカルボニル、シクロヘプタンカルボニル、クロトニル、2-シクロヘキセンカルボニル、ベンゾイル、ニコチノイル、メタンスルホニル、エタンスルホニル等）が挙げられ、上記した(2)置換されていてもよいアルキル、(3)置換されていてもよいシクロアルキル、(4)置換されていてもよいアルケニル、(5)置換されていてもよいシクロアルケニル、(6)置換されていてもよい5～6員の単環の芳香族基および(7)置換されていてもよい5～6員の単環の非芳香族複素環基が有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モル

ホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基(例、カルボキシル、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル(例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、 $C_{1-4}$ アルキレンジオキシ(例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$ など)、置換されていてもよいスルホンアミド〔例、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど)が $-SO_2-$ に結合して形成される基など〕、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

## 【0095】

$R^{e1d}$ の置換基としてのエステル化されていてもよいカルボキシル基としては、(1)水素、

(2)置換されていてもよいアルキル(例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級( $C_{1-6}$ )アルキルなどが挙げられる)；

(3)置換されていてもよいシクロアルキル(例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどの $C_{3-7}$ シクロアルキルなどが挙げられる)；

(4)置換されていてもよいアルケニル(例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2～10のアルケニル、好ましくは

低級 ( $C_{2-6}$ ) アルケニルなどが挙げられる) ;

(5) 置換されていてもよいシクロアルケニル (例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数 3~7 のシクロアルケニルなどが挙げられる) ;

(6) 置換されていてもよいアリール (例えば、フェニル、ナフチルなど) などがカルボニルオキシ基と結合したもの、好ましくはカルボキシル、低級 ( $C_{1-6}$ ) アルコキシカルボニル、アリールオキシカルボニル (例、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、フェノキシカルボニル、ナフトキシカルボニルなど) などが挙げられ、上記した (2) 置換されていてもよいアルキル、(3) 置換されていてもよいシクロアルキル、(4) 置換されていてもよいアルケニル、(5) 置換されていてもよいシクロアルケニル、および (6) 置換されていてもよいアリールが有していてもよい置換基としては、ハロゲン (例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基 (例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基 (例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの 5~6 員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基 (例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルキル (例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど)、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル (例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル (例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど) などが挙げられ、置換基の数としては、1~3 個が好ましい。

【0096】

また、 $R^{e1d}$  の置換基としてのアミド化されていてもよいカルボキシル基としては、上記した「 $R^{e1d}$  の置換基としての置換されていてもよいアミノ基」

と同様な「置換されていてもよいアミノ基」などがカルボニル基と結合したもの、好ましくはカルバモイル、モノ $C_{1-6}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-6}$ アルキルカルバモイルなどが挙げられる。

$R^{e1d}$ の置換基としての置換されていてもよい芳香族基における芳香族基としては、フェニル、ピリジル、フリル、チエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、イソチアゾリル、イソキサゾリル、テトラゾリル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル、トリアゾリル、オキサジアゾリル、チアジアゾリル等の5～6員の同素または複素環芳香族基、ベンゾフラン、インドール、ベンゾチオフェン、ベンズオキサゾール、ベンズチアゾール、インダゾール、ベンズイミダゾール、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、フタラジン、キナゾリン、シンノリンなどの縮環複素環芳香族基などが挙げられる。これらの芳香族基の置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ニトロ、シアノ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5～6員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシ基（例、カルボキシ、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルキル（例、トリフルオロメチル、メチル、エチルなど）、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3個が好ましい。

かかる $R^{e1d}$ の置換基は、1～4個（好ましくは、1～2個）同一または異なって環のいずれの位置に置換していてもよい。

また、 $R^{ed}$ で示される基が5～6員芳香環と結合して環を形成する場合、式

$R^{ed}-Z^{eld}-X^{ed}-Z^{ed2}-$  (式中、各記号は前記と同意義;  $R^{ed}$  としては水素原子が好ましい) で表される基は、例えば、低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキレンジオキシ (例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-CH_2-O-$  など)、オキシ低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキレンアミノ (例、 $-O-CH_2-NH-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-NH-$  など)、オキシ低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキレンチオ (例、 $-O-CH_2-S-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-S-$  など)、低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキレンジアミノ (例、 $-NH-CH_2-NH-$ 、 $-NH-CH_2-CH_2-NH-$  など)、チア低級 ( $C_{1-6}$ ) アルキレンアミノ (例、 $-S-CH_2-NH-$ 、 $-S-CH_2-CH_2-NH-$  など)、などの2価の基を形成する。

## 【0097】

$R^{eld}$  で示される「式  $R^{ed}-Z^{eld}-X^{ed}-Z^{ed2}-$  (式中、各記号は前記と同意義を示す。) で表される置換基を有し、さらに置換基を有していてもよい5~6員芳香環」の「5~6員環」が、式  $R^{ed}-Z^{eld}-X^{ed}-Z^{ed2}-$  で表される基以外に有していてもよい「置換基」としては、とりわけ、ハロゲン化または低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル (例、メチル、エチル、*t*-ブチル、トリフルオロメチル、メトキシメチル、エトキシメチル、プロポキシメチル、ブトキシメチル、メトキシエチル、エトキシエチル、プロポキシエチル、ブトキシエチルなど)、ハロゲン化または低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ化されていてもよい低級 ( $C_{1-4}$ ) アルコキシ (例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、*t*-ブトキシ、トリフルオロメトキシ、メトキシメトキシ、エトキシメトキシ、プロポキシメトキシ、ブトキシメトキシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、プロポキシエトキシ、ブトキシエトキシ、メトキシプロポキシ、エトキシプロポキシ、プロポキシプロポキシ、ブトキシプロポキシなど)、ハロゲン (例、フッ素、塩素など)、ニトロ、シアノ、1~2個の低級 ( $C_{1-4}$ ) アルキル、ホルミルまたは低級 ( $C_{2-4}$ ) アルカノイルで置換されていてもよいアミノ (例、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ホルミルアミノ、アセチルアミノなど)、5~6員の環状アミノ (例、1-ピロリジニル、1-ピペラジニル、1-ピペリジニル、4-

モルホリノ、4-チオモルホリノ、1-イミダゾリル、4-テトラヒドロピラニルなど)などが挙げられる。

また、 $R^{e1d}$  がベンゼンである場合、式  $R^{ed}-Z^{e1d}-X^{ed}-Z^{e2d}$  で表される基の置換位置としては、パラ位が好ましく、式  $R^{ed}-Z^{e1d}-X^{ed}-Z^{e2d}$  で表される基以外に「5～6員芳香環」が有しているもよい「置換基」の置換位置としては、メタ位が好ましい。

上記式中、 $Y^{ed}$  で示される「置換されていてもよいイミノ基」としては、例えば、式  $-N(R^{e5d})-$  [式中、 $R^{e5d}$  は水素原子または置換基を示す。] で表される2価の基などが挙げられる。

$R^{e5d}$  としては、水素原子、置換されていてもよい炭化水素基、置換されていてもよい複素環基、置換されていてもよい水酸基、置換されていてもよいチオール基（硫黄原子は酸化されていてもよく、置換されていてもよいスルフィニル基または置換されていてもよいスルホニル基を形成していてもよい）、置換されていてもよいアミノ基、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基、置換されていてもよいアシル基などが好ましく、水素原子、置換されていてもよい炭化水素基、置換されていてもよい複素環基、置換されていてもよいアシル基などがさらに好ましい。

$R^{e5d}$  の好ましい態様としては、水素原子、置換されていてもよい炭化水素基、置換されていてもよいアシル基などが挙げられ、 $C_{1-4}$  アルキル、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル、ホルミル、 $C_{2-5}$  アルカノイルなどがより好ましく、 $C_{1-4}$  アルキル、ホルミル、 $C_{2-5}$  アルカノイルなどがさらに好ましく、とりわけ、ホルミルまたはエチルが好ましい。 $R^{e5d}$  の他の好ましい態様としては、式  $-(CH_2)_{ek}-R^{e6d}$  [式中、 $ek$  は0または1を示し、 $R^{e6d}$  は置換されていてもよい5～6員の単環の芳香族基（例えば、 $R^{e1d}$  の置換基としての置換されていてもよいアシル基の項において例示された「(6)置換されていてもよい5～6員の単環の芳香族基」と同様なものなど；好ましくはハロゲン、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルキル、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$  アルコキシなどでそれぞれ置換されていてもよいフェニル、ピラゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、テトラゾリルなど)を示す。] で表される

基などが挙げられる。

【0098】

また、 $R^{e5d}$ としての「置換されていてもよい炭化水素基」の具体的な例としては、 $R^{ed}$ としての「置換されていてもよい炭化水素基」と同様なものが挙げられ、 $R^{e5d}$ としての「置換されていてもよい複素環基」の具体的な例としては、 $R^{ed}$ で示される「置換されていてもよい炭化水素基」の置換基としての「置換されていてもよい複素環基」と同様なものが挙げられ、 $R^{e5d}$ としての「置換されていてもよい水酸基」、「置換されていてもよいチオール基」、「置換されていてもよいアミノ基」、「エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基」および「置換されていてもよいアシル基」の具体的な例としては、 $R^{e1d}$ の置換基としての「置換されていてもよい水酸基」、「置換されていてもよいチオール基」、「置換されていてもよいアミノ基」、「エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基」および「置換されていてもよいアシル基」と同様なものが挙げられる。

上記式(e1d)中、 $R^{e2d}$ および $R^{e3d}$ で示される「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基（脂肪族鎖式炭化水素基および脂肪族環式炭化水素基）」としては、例えば、

(1) 置換されていてもよいアルキル（例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシルなどの $C_{1-10}$ アルキル、好ましくは低級( $C_{1-6}$ )アルキルなどが挙げられる)；

(2) 置換されていてもよいシクロアルキル（例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどの $C_{3-8}$ シクロアルキルなどが挙げられる)；

(2-1) 該シクロアルキルは、硫黄原子、酸素原子および窒素原子から選ばれるヘテロ原子を1個含有し、オキシラン、チオラン、アジリジン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ピロリジン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピラン、1-オキシド、ピペリジンなど（好



ましくは、6員環のテトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピラン、ピペリジンなど)を形成していてもよく;

(2-2) また、該シクロアルキルは、ベンゼン環と縮合し、インダン、テトラヒドロナフタレンなど(好ましくは、インダンなど)を形成していてもよく;

(2-3) さらに、該シクロアルキルは、炭素数1~2の直鎖状の原子鎖を介して架橋し、ビスクロ[2. 2. 1]ヘプチル、ビスクロ[2. 2. 2]オクチル、ビスクロ[3. 2. 1]オクチル、ビスクロ[3. 2. 2]ノニルなど(好ましくは、炭素数1~2の直鎖状の原子鎖を介した架橋を有するシクロヘキシルなど、さらに好ましくは、ビスクロ[2. 2. 1]ヘプチルなど)の架橋環式炭化水素残基を形成していてもよい;

(3) 置換されていてもよいアルケニル(例えば、アリル(allyl)、クロチル、2-ペンテニル、3-ヘキセニルなど炭素数2~10のアルケニル、好ましくは低級( $C_{2-6}$ )アルケニルなどが挙げられる);

(4) 置換されていてもよいシクロアルケニル(例えば、2-シクロペンテニル、2-シクロヘキセニル、2-シクロペンテニルメチル、2-シクロヘキセニルメチルなど炭素数3~7のシクロアルケニルなどが挙げられる); などが挙げられる。

#### 【0099】

上記した(1)置換されていてもよいアルキル、(2)置換されていてもよいシクロアルキル、(3)置換されていてもよいアルケニル、および(4)置換されていてもよいシクロアルケニルが有していてもよい置換基としては、ハロゲン(例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など)、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルキル、ハロゲン化されていてもよい $C_{1-4}$ アルコキシ(例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど)、 $C_{1-4}$ アルキレンジオキシ(例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$ など)、ホルミル、 $C_{2-4}$ アルカノイル(例、アセチル、プロピオニルなど)、 $C_{1-4}$ アルキルスルホニル(例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど)、フェニル-低級( $C_{1-4}$ )アルキル、 $C_{3-7}$ シクロアルキル、シアノ、ニトロ、水酸基、置換されていてもよいチオール基(

例、チオール、 $C_{1-4}$ アルキルチオなど)、置換されていてもよいアミノ基(例、アミノ、モノ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、ジ $C_{1-4}$ アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの5~6員の環状アミノなど)、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシ基(例、カルボキシ、 $C_{1-4}$ アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイル、ジ $C_{1-4}$ アルキルカルバモイルなど)、低級( $C_{1-4}$ )アルコキシカルボニル、オキシ基(好ましくは、ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルキル、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルコキシ、フェニル-低級( $C_{1-4}$ )アルキル、 $C_{3-7}$ シクロアルキル、シアノ、水酸基など)などが挙げられ、置換基の数としては、1~3個が好ましい。

$R^{e2d}$ および $R^{e3d}$ で示される「置換されていてもよい脂肪族炭化水素基」としては、

(1) ハロゲン、シアノ、水酸基または $C_{3-7}$ シクロアルキルを1~3個有していてもよい直鎖または分枝状の低級( $C_{1-6}$ )アルキル；

(2) ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級( $C_{1-4}$ )アルキルまたはフェニル-低級( $C_{1-4}$ )アルキルを1~3個有していてもよく、硫黄原子、酸素原子および窒素原子から選ばれるヘテロ原子を1個含有していてもよく、ベンゼン環と縮合していてもよく、炭素数1~2の直鎖状の原子鎖を介して架橋していてもよい $C_{5-8}$ シクロアルキル(例、それぞれ置換されていてもよいシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、テトラヒドロピラニル、テトラヒドロチアピラニル、ピペリジニル、インダニル、テトラヒドロナフタレニル、ビスクロ[2.2.1]ヘプチルなど)；などが好ましい。

上記式(eId)中、 $R^{e2d}$ および $R^{e3d}$ で示される「置換されていてもよい脂環式(非芳香族)複素環基」としては、例えば、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ジオキサラン、ジチオラン、オキサチオラン、ピロリジン、ピロリン、イミダゾリジン、イミダゾリン、ピラゾリジン、ピラゾリン、ピペリジン、ピペラジン、オキサジン、オキサジアジン、チアジン、チアジアジン、モルホリン、チオモルホリン、ピラン、テトラヒドロピランなどの窒素原子、

硫黄原子および酸素原子から選ばれた 1～2 種のヘテロ原子 1～4 個を含有する 5～6 員の非芳香族複素環；などが挙げられるが、テトラヒドロフラン、ピペリジン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピランなどの 1 個のヘテロ原子を含有する 5～6 員の非芳香族複素環などが好ましい。

# 【0100】

$R^{e2d}$  および  $R^{e3d}$  で示される「置換されていてもよい脂環式複素環基」における「脂環式複素環基」が有していてもよい置換基としては、ハロゲン（例、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素など）、ハロゲン化されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、ハロゲン化されていてもよい  $C_{1-4}$  アルコキシ（例、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、トリフルオロメトキシ、トリフルオロエトキシなど）、 $C_{1-4}$  アルキレンジオキシ（例、 $-O-CH_2-O-$ 、 $-O-CH_2-CH_2-O-$  など）、ホルミル、 $C_{2-4}$  アルカノイル（例、アセチル、プロピオニルなど）、 $C_{1-4}$  アルキルスルホニル（例、メタンスルホニル、エタンスルホニルなど）、フェニル—低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、 $C_{3-7}$  シクロアルキル、シアノ、ニトロ、水酸基、置換されていてもよいチオール基（例、チオール、 $C_{1-4}$  アルキルチオなど）、置換されていてもよいアミノ基（例、アミノ、モノ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、ジ  $C_{1-4}$  アルキルアミノ、テトラヒドロピロール、ピペラジン、ピペリジン、モルホリン、チオモルホリン、ピロール、イミダゾールなどの 5～6 員の環状アミノなど）、エステル化またはアミド化されていてもよいカルボキシル基（例、カルボキシル、 $C_{1-4}$  アルコキシカルボニル、カルバモイル、モノ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイル、ジ  $C_{1-4}$  アルキルカルバモイルなど）、低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ—カルボニル、オキソ基（好ましくは、ハロゲン、ハロゲン化されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、ハロゲン化されていてもよい低級（ $C_{1-4}$ ）アルコキシ、フェニル—低級（ $C_{1-4}$ ）アルキル、 $C_{3-7}$  シクロアルキル、シアノ、水酸基など）などが挙げられ、置換基の数としては、1～3 個が好ましい。

なかでも、 $R^{e2d}$  としては、置換されていてもよい鎖状炭化水素基（例、それぞれ置換されていてもよいアルキル、アルケニルなど）が好ましく、置換されていてもよい低級  $C_{1-6}$  アルキル基がさらに好ましく、とりわけ置換されてい

でもよいメチル基が好ましい。

$R^{e3d}$ としては、置換されていてもよい脂環式炭化水素基（例、それぞれ置換されていてもよいシクロアルキル、シクロアルケニルなど；好ましくは、置換されていてもよい低級 $C_3-8$ シクロアルキル基；さらに好ましくは置換されていてもよいシクロヘキシル）または置換されていてもよい脂環式複素環基（好ましくは、置換されていてもよい飽和の脂環式複素環基（好ましくは6員環基）；さらに好ましくは、置換されていてもよいテトラヒドロピラニル、置換されていてもよいテトラヒドロチオピラニルまたは置換されていてもよいピペリジル；とりわけ好ましくは、置換されていてもよいテトラヒドロピラニル）が好ましい。

尚、一般式（IV）で表わされる化合物またはその塩は水和物であってもよく、以下、塩、水和物も含め化合物（IV）と称する。

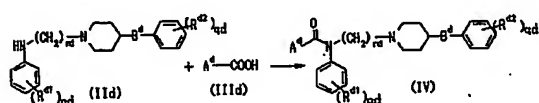
#### 【0101】

化合物（IV）は、例えば以下に示される方法等によって製造される。

#### 製造法1

下式で示すとおり、式（II d）で表される化合物またはその塩（以下単に化合物（II d）という）と式（III d）で表される化合物もしくはその塩またはそのカルボキシル基における反応性誘導体（以下単に化合物（III d）という）とを反応させることにより化合物（IV）を製造することができる。

#### 【化40】



（式中、各記号は前記と同意義である。）

式（III d）で表される化合物のカルボキシル基における反応性誘導体としてはたとえば酸ハライド、酸アジド、酸無水物、混合酸無水物、活性アミド、活性エステル、活性チオエステルなどの反応性誘導体がアシル化反応に供される。酸ハライドとしてはたとえば酸クロライド、酸ブロマイドなどが、混合酸無水物としてはモノ $C_1-6$ アルキル炭酸混合酸無水物（たとえば遊離酸とモノメチル炭酸、モノエチル炭酸、モノイソプロピル炭酸、モノイソブチル炭酸、モノtert-ブチル炭酸、モノベンジル炭酸、モノ（p-ニトロベンジル）炭酸、モノアリル

炭酸などとの混合酸無水物)、 $C_{1-6}$  脂肪族カルボン酸混合酸無水物 (たとえば遊離酸と酢酸、トリクロロ酢酸、シアノ酢酸、プロピオン酸、酪酸、イソ酪酸、吉草酸、イソ吉草酸、ピバル酸、トリフルオロ酢酸、トリクロロ酢酸、アセト酢酸などとの混合酸無水物)、 $C_{7-12}$  芳香族カルボン酸混合酸無水物 (たとえば遊離酸と安息香酸、*p*-トルイル酸、*p*-クロロ安息香酸などとの混合酸無水物)、有機スルホン酸混合酸無水物 (たとえば遊離酸とメタンスルホン酸、エタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、*p*-トルエンスルホン酸などとの混合酸無水物) などが、活性アミドとしては含窒素複素環化合物とのアミド [たとえば遊離酸とピラゾール、イミダゾール、ベンゾトリアゾールなどとの酸アミドで、これらの含窒素複素環化合物は $C_{1-6}$  アルキル基 (例、メチル、エチル等)、 $C_{1-6}$  アルコキシ基 (例、メトキシ、エトキシ等)、ハロゲン原子 (例、フッ素、塩素、臭素等)、オキソ基、チオキソ基、 $C_{1-6}$  アルキルチオ基 (例、メチルチオ、エチルチオ等) などで置換されていてもよい。] などがあげられる。

活性エステルとしては $\beta$ -ラクタムおよびペプチド合成の分野でこの目的に用いられるものはすべて利用でき、たとえば有機リン酸エステル (たとえばジエトキシリン酸エステル、ジフェノキシリン酸エステルなど) のほか *p*-ニトロフェニルエステル、2, 4-ジニトロフェニルエステル、シアノメチルエステル、ペンタクロロフェニルエステル、*N*-ヒドロキシサクシンイミドエステル、*N*-ヒドロキシフタルイミドエステル、1-ヒドロキシベンゾトリアゾールエステル、6-クロロ-1-ヒドロキシベンゾトリアゾールエステル、1-ヒドロキシー-1*H*-2-ピリドンエステルなどがあげられる。活性チオエステルとしては芳香族複素環チオール化合物とのエステル [たとえば2-ピリジルチオールエステル、2-ベンゾチアゾリルチオールエステルなどで、これらの複素環は $C_{1-6}$  アルキル基 (例、メチル、エチル等)、 $C_{1-6}$  アルコキシ基 (例、メトキシ、エトキシ等)、ハロゲン原子 (例、フッ素、塩素、臭素等)、 $C_{1-6}$  アルキルチオ基 (例、メチルチオ、エチルチオ等) などで置換されていてもよい。] が挙げられる。

#### 【0102】

Lで示される脱離基としては、たとえばハロゲン原子 (例、塩素原子、臭素原

子、ヨウ素原子など)、アルキルまたはアリールスルホニルオキシ基(例、メタンスルホニルオキシ、トリフルオロメタンスルホニルオキシ、エタンスルホニルオキシ、ベンゼンスルホニルオキシ、p-トルエンスルホニルオキシなど)などが挙げられる。

この反応は、通常反応に不活性な溶媒中で行われる。該溶媒としては、たとえばエーテル系溶媒(例、エチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ジメトキシエタン、テトラヒドロフラン、ジオキサンなど)、ハロゲン系溶媒(例、ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルムなど)、芳香族系溶媒(例、トルエン、クロロベンゼン、キシレンなど)、アセトニトリル、N,N-ジメチルホルムアミド(DMF)、アセトン、メチルエチルケトン、ジメチルスルホキシド(DMSO)、水などを単独あるいはそれらを混合して用いることができる。中でもアセトニトリル、ジクロロメタン、クロロホルムなどが好ましい。この反応は通常化合物(II d)に対し、化合物(III d) 1ないし5当量、好ましくは1ないし3当量反応させることにより行われる。反応温度は-20℃から50℃、好ましくは0℃ないし室温であり、反応時間は通常5分間から100時間である。またこの反応においては塩基を共存させることにより、反応がより円滑に進行する場合もある。該塩基としては、無機塩基、有機塩基ともに有効である。無機塩基の例としては、アルカリ金属やアルカリ土類金属の水酸化物、水素化物、炭酸塩、炭酸水素塩などがあげられ、中でも炭酸カリウム、炭酸ナトリウム、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウムが好ましい。有機塩基としてはトリエチルアミンなどの3級アミン類が好ましい。式(II d)で表される化合物のカルボキシル基における反応性誘導体は前記のとおりであるが、中でも酸ハライドが好ましい。該塩基の使用量は、化合物(II d)に対し、通常1ないし10当量、好ましくは1ないし3当量である。

カルボン酸からアシル化する場合には、不活性溶媒中(例えば、ハロゲン系溶媒、アセトニトリル)、化合物(II d)とこれ1当量に対し1ないし1.5当量のカルボン酸( $A^d-CO_2H$ )とを1ないし1.5当量のジシクロヘキシルカルボジイミド(DCC)などの脱水縮合剤存在下反応させることにより行われる。この反応は通常室温下に行われ、反応時間は0.5ないし24時間である。

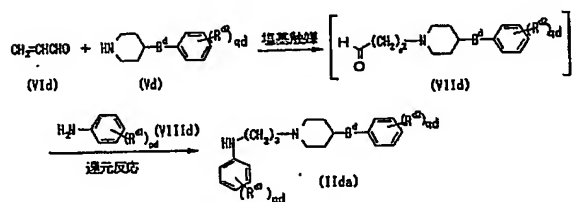
この反応において原料として用いられる化合物 (III d) はたとえばHeterocycles, 43(10) 2131-2138 (1996)などに記載の化合物を原料にして公知の一般的方法により合成することができる。

この方法において用いられる化合物 (I I d) はたとえばChem. Pharm. Bull. 47(1) 28-36 (1999)、特開昭 5 6 - 5 3 6 5 4 などに記載の方法またはそれらに準じた方法により製造することができる。

【 0 1 0 3 】

また、化合物 (I I d) のうち r d が 3 のものは、たとえば, Synthetic Comm., 1991, 20, 3167-3180. に記載の方法によって製造することができる。すなわち、アミン類やアミド類の不飽和結合に対する付加反応を利用して、つぎの方法によって製造することができる。

【化 4 1】



(式中、各記号は前記と同意義である。)

アクロレイン (V I d) と化合物 (V d) を反応させ、ついでその生成物 (V I I d) に還元条件下化合物 (V I I I d) を反応させることにより得ることができる。化合物 (V I d) と化合物 (V d) の反応は通常反応に不活性な溶媒中塩基の存在下に行われる。該塩基としては 1) 強塩基例えば、アルカリ金属またはアルカリ土類金属の水素化物 (例、水素化リチウム、水素化ナトリウム、水素化カリウム、水素化カルシウムなど)、アルカリ金属またはアルカリ土類金属のアミド類 (例、リチウムアミド、ナトリウムアミド、リチウムジイソプロピルアミド、リチウムジシクロヘキシルアミド、リチウムヘキサメチルジシラジド、ナトリウムヘキサメチルジシラジド、カリウムヘキサメチルジシラジドなど)、アルカリ金属またはアルカリ土類金属の低級アルコキシド (例、ナトリウムメトキシド、ナトリウムエトキシド、カリウム tert-ブトキシドなど) など、2) 無機塩基例えば、アルカリ金属またはアルカリ土類金属の水酸化物 (例、水酸化ナトリウ

ム、水酸化カリウム、水酸化リチウム、水酸化バリウムなど）、アルカリ金属またはアルカリ土類金属の炭酸塩（例、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸セシウムなど）、アルカリ金属またはアルカリ土類金属の炭酸水素塩（例、炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウムなど）など、3) 有機塩基等例えば、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、N-メチルモルホリン、ジメチルアミノピリジン、DBU（1,8-ジアザビスクロ〔5.4.0〕-7-ウンデセン）、DBN（1,5-ジアザビスクロ〔4.3.0〕ノン-5-エン）などのアミン類あるいはピリジン、イミダゾール、2,6-ルチジンなどの塩基性複素環化合物などが挙げられる。該溶媒としては、前記化合物（II d）と化合物（III d）との反応において述べた溶媒が挙げられ、これらを単独または混合して用いることができる。この反応において化合物（VII d）が得られる。

化合物（VII d）と化合物（VIII d）との反応における還元剤としては、例えば水素化ホウ素ナトリウム、水素化ホウ素リチウム、シアノ水素化ホウ素ナトリウム、トリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウムなどが挙げられる。これらの還元剤の使用量は化合物（VII d）に対し通常1～10当量、好ましくは1～4当量である。反応温度は-20～50℃、好ましくは0℃～室温であり、反応時間は0.5～24時間である。

また該反応は接触還元法によっても行なうことができる。たとえば、触媒量のラネーニッケル、酸化白金、金属パラジウム、パラジウム-炭素などの金属触媒と不活性溶媒中（例えば、メタノール、エタノール、イソプロパノール、t-ブタノール等のアルコール性溶媒）、室温ないし100℃、水素圧が1気圧から100気圧において、1ないし48時間反応させることにより化合物（II d a）が得られる。

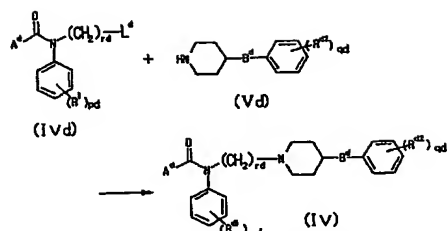
#### 【0104】

#### 製造法2

下式で示すとおり、式（IV d）で表される化合物またはその塩（以下単に化合物（IV d）という）と式（V d）で表される化合物またはその塩（以下単に化合物（V d）という）とを反応させることにより化合物（IV）を製造することができる。



## 【化 4 2】



(式中、 $L^d$  は脱離基を示し、他の記号は前記と同意義である。)

$L^d$  で示される脱離基としては、たとえばハロゲン原子（例、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子など）、アルキルまたはアリアルスルホニルオキシ基（例、メタンスルホニルオキシ、トリフルオロメタンスルホニルオキシ、エタンスルホニルオキシ、ベンゼンスルホニルオキシ、p-トルエンスルホニルオキシなど）などが挙げられる。

この反応は例えば、オーガニックファンクショナルグループプレパレーションズ (ORGANIC FUNCTIONAL GROUP PREPARATIONS) 第2版、アカデミックプレス社 (ACADEMIC PRESS, INC.) 記載の方法に準じて行うことができる。

この反応は通常反応に不活性な溶媒中で行われる。該性溶媒としてアルコール系溶媒、エーテル系溶媒、ハロゲン系溶媒、芳香族系溶媒、アセトニトリル、N,N-ジメチルホルムアミド (DMF)、アセトン、メチルエチルケトン、ジメチルスルホキシド (DMSO) などを単独あるいはそれらを混合して用いることができる。中でもアセトニトリル、ジメチルホルムアミド、アセトン、エタノールなどが好ましい。反応温度は通常室温ないし  $100^{\circ}\text{C}$ 、好ましくは室温ないし  $50^{\circ}\text{C}$  であり反応時間は通常0.5ないし1日である。この反応は通常は化合物 (IVd) に対し1ないし3当量の塩基を加えるが、必ずしも必須ではない。該塩基としては、上記化合物 (II d) と化合物 (III d) との反応に用いた塩基を用いることができる。

この反応において原料として用いられる化合物 (IV d) は化合物 (III d) を原料にして公知の一般的方法により合成することができる。

上記式 (I)、(II)、(III)、(IV) および (e I) で表わされる化合物の塩としては酸付加塩、例えば無機酸塩（例えば、塩酸塩、硫酸塩、臭化水素酸塩、リン酸塩など）、有機酸塩（例えば、酢酸塩、トリフルオロ酢酸塩、コハ

ク酸塩、マレイン酸塩、フマル酸塩、プロピオン酸塩、クエン酸塩、酒石酸塩、乳酸塩、蔞酸塩、メタンスルホン酸塩、p-トルエンスルホン酸塩など）等のほか、塩基との塩（たとえば、カリウム塩、ナトリウム塩、リチウム塩等のアルカリ金属塩、カルシウム塩、マグネシウム塩等のアルカリ土類金属塩、アンモニウム塩、トリメチルアミン塩、トリエチルアミン塩、tert-ブチルジメチルアミン塩、ジベンジルメチルアミン塩、ベンジルジメチルアミン塩、N,N-ジメチルアニリン塩、ピリジン塩、キノリン塩などの有機塩基との塩）を形成していてもよい。

### 【0105】

本発明の予防剤は、動物、とりわけ哺乳動物（例えば、ヒト、サル、ブタ、イヌ、ネコ、ウサギ、モルモット、ラット、マウス等）に対して、優れたHIV感染症予防作用を示し、輸血時および血液製剤使用時におけるHIV感染の予防に有用である。

本発明の予防剤は毒性が低く、医薬として用いる場合、それ自体あるいは適宜、薬理学的に許容される担体、賦形剤、希釈剤と、常法に従って、適宜、適量混合し、粉末、顆粒、錠剤、カプセル剤（ソフトカプセル、マイクロカプセルを含む）、液剤、注射剤、坐剤等の剤型に製剤化でき、経口的または非経口的に安全に投与することができる。また、それ自体を輸血用血液または血液製剤に直接添加することもできる。

本明細書において、非経口とは、皮下注射、静脈内注射、筋肉内注射、腹腔内注射あるいは点滴法等を含むものである。注射用調剤、例えば、無菌注射用水性懸濁物あるいは油性懸濁物は、適当な分散化剤または湿化剤および懸濁化剤を用いて当該分野で知られた方法で調製されうる。その無菌注射用調剤は、また、例えば水溶液等の非毒性の非経口投与することのできる希釈剤あるいは溶剤中の無菌の注射のできる溶液または懸濁液であってもよい。使用することのできる担体あるいは溶剤として許されるものとしては、水、リンゲル液、等張食塩液等が挙げられる。さらに、通常溶剤または懸濁化溶媒として無菌の不揮発性油も用いられうる。このためには、いかなる不揮発性油も脂肪酸も使用でき、天然あるいは合成あるいは半合成の脂肪性油または脂肪酸、そして天然あるいは合成あるいは

半合成のモノあるいはジあるいはトリグリセリド類も含められる。

直腸投与用の坐剤は、その薬物と適当な非刺激性の補形剤、例えば、ココアバターやポリエチレングリコール類といった常温では固体であるが腸管の温度では液体で、直腸内で融解し、薬物を放出するもの等と混合して製造されることができ。

経口投与用の固形投与剤型としては、粉剤、顆粒剤、錠剤、ピル剤、カプセル剤等が挙げられる。そのような剤型において、活性成分化合物は、少なくとも一つの添加物、例えば、ショ糖、乳糖、セルロース糖、マンニトール、マルチトール、デキストラン、デンプン類、寒天、アルギネート類、キチン類、キトサン類、ペクチン類、トラガントガム類、アラビアゴム類、ゼラチン類、コラーゲン類、カゼイン、アルブミン、合成または半合成のポリマー類またはグリセリド類と混合することができる。そのような剤型物はまた、通常の如く、さらなる添加物を含むことができ、例えば不活性希釈剤、マグネシウムステアレート等の滑沢剤、パラベン類、ソルビン酸等の保存剤、アスコルビン酸、 $\alpha$ -トコフェロール、システイン等の抗酸化剤、崩壊剤、結合化剤、増粘剤、緩衝化剤、甘味付与剤、フレーバー付与剤、パーフューム剤等が挙げられる。錠剤およびピル剤はさらにエンテリックコーティングされて製造されることもできる。経口投与用の液剤は、医薬として許容されるエマルジョン剤、シロップ剤、エリキシル剤、懸濁剤、溶液剤等が挙げられ、それらは当該分野で普通用いられる不活性希釈剤、例えば水を含んでいてよい。

#### 【 0 1 0 6 】

本発明の剤の投与量は、投与対象、投与対象の年齢および体重、症状、投与時間、投与方法、剤型などにより、適宜選択することができる。

ある特定の患者の投与量は、年令、体重、一般的健康状態、性別、食事、投与時間、投与方法、排泄速度、患者のその時に治療を行っている病状の程度に応じ、それらあるいはその他の要因を考慮して決められる。例えば、輸血時および血液製剤使用時におけるHIV感染症の予防として成人（体重約60kg）に経口投与する場合、通常1回量として、CCR拮抗薬として約0.02ないし50mg/kg、好ましくは0.05ないし30mg/kg、さらに好ましくは、0.1ないし

10 mg/kg程度であり、これらの服用量を1日約1ないし約3回程度投与するのが望ましい。当然ながら、これらの用量範囲は一日投与量を分割するために必要な単位ベースで調節できるが、前記のように用量は疾患の性質および程度、患者の年齢、体重、一般的健康状態、性別、食事、投与時間、投与方法、排泄速度、それらあるいはその他の要因を考慮して決められる。

本発明の剤の投与方法は適宜選択することができ、輸血前または血液製剤使用前に輸血する血液または血液製剤に本発明のHIV感染症予防剤を直接加えてもよい。その際には直前ないし24時間前、好ましくは直前ないし12時間前、さらに好ましくは直前ないし6時間前に混合するのが望ましい。

輸血時または血液製剤使用時に輸血する血液または血液製剤とは別に本発明のHIV感染症予防剤を投与する場合には輸血または血液製剤使用1時間前ないし同時に投与するのが望ましく、さらに好ましくは1日1ないし3回4週間投与を続けるのが望ましい。

【0107】

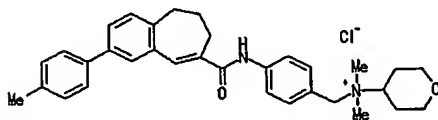
#### 【実施例】

以下に、実験例および製剤例を挙げて、本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

#### 実験例

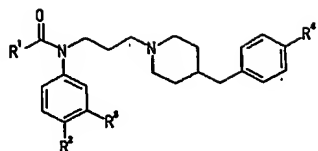
CCR5に対する選択的拮抗薬である式：

【化43】



で表されるN,N-ジメチル-N-(4-(((2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル)カルボニル)アミノ)ベンジル)-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウムクロライド(化合物A)、式：

【化 4 4】

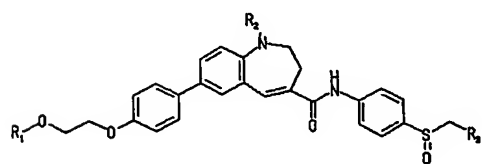


【表 1】

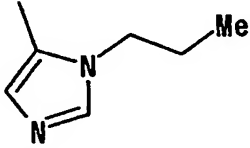
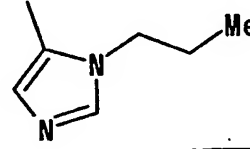
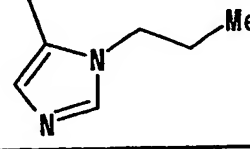
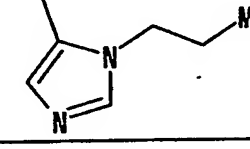
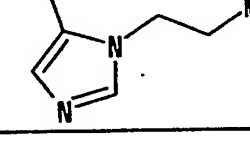
	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>
化合物 B		H	H	CONH <sub>2</sub>
化合物 C		H	H	SO <sub>2</sub> Me
化合物 D		H	H	SO <sub>2</sub> -N<img alt="morpholine ring" data-bbox="615 495 665 525"/>
化合物 E		Me	Cl	CONH <sub>2</sub>
化合物 F		Me	Cl	CONH <sub>2</sub>
化合物 G		Me	Cl	F

で表される化合物 B～G：

【化 4 5】



【表 2】

	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>
化合物H	butyl	isobutyl	
化合物I	butyl	isobutyl	
化合物J	butyl	isobutyl	
化合物K	butyl	propyl	
化合物L	propyl	isobutyl	

で表される化合物 H～Lを用いて、HIV感染に対する増殖抑制効果について検討した。

#### 方法

#### 細胞

MOLT-4/CCR5細胞 (AIDS Res.Hum.Retrovir. 16, 935-941(2000))

を用いた。

#### 薬物

化合物はDMSOに溶解し、10% FBS、1mg/mL G418 (GIBCO) を含むRPMI 1640培地で適宜希釈した。

#### ウイルス

R5 HIV-1の実験室株であるBa-L株を用いた。

#### 感染

感染は細胞 ( $4 \times 10^6$  cells/1 mL) に 1000 CCID<sub>50</sub> のウイルスを添加し、6 時間インキュベートして行った。細胞に未吸着のウイルスを洗浄除去後、感染細胞を 2 mL の培地に懸濁し、96 ウェルプレートに感染細胞を 100  $\mu$  L、化合物を 100  $\mu$  L 分注し、5% CO<sub>2</sub> 存在下 37℃ で 3 日間培養した。感染 3 日後に同濃度の化合物を含む培地で 5 倍希釈し、さらに 2 日間培養した。培養後、上清中の p24 量を市販の ELISA キット (ZeptoMetrix) を用いて測定した。感染阻害率は対照群の p24 量に対する薬物投与群の p24 量として計算した。

#### 結果

HIV-1 を感染させた細胞に化合物を添加し、5 日間培養したところ、いずれの化合物も 1000 nmol/L の濃度で強い感染阻害効果を示した (図 1)

#### 【0108】

##### 製剤例 1 カプセル剤

(1) N,N-ジメチル-N-(4-(((2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル)カルボニル)アミノ)-ベンジル)-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウムクロライド 40 mg、

(2) ラクトース 70 mg

(3) 微結晶セルロース 9 mg

(4) ステアリン酸マグネシウム 1 mg

1 カプセル 120 mg

(1)、(2)、(3) および (4) の 1/2 を混和した後、顆粒化する。これに残りの (4) を加えて全体をゼラチンカプセルに封入する。

##### 製剤例 2 錠剤

(1) N,N-ジメチル-N-(4-(((2-(4-メチルフェニル)-6,7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル)カルボニル)アミノ)-ベンジル)-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウムクロライド 40 mg

(2) ラクトース 58 mg

(3) コーンスターチ 18 mg



(4) 微結晶セルロース 3. 5 m g

(5) ステアリン酸マグネシウム 0. 5 m g

1 錠 1 2 0 m g

(1)、(2)、(3)、(4) の 2 / 3 および (5) の 1 / 2 を混和後、顆粒化する。これに残りの (4) および (5) をこの顆粒に加えて錠剤に加圧成型する。

### 製剤例 3 注射剤

日局注射用蒸留水 1 0 m l に N, N-ジメチル-N-(4-(((2-(4-メチルフェニル)-6, 7-ジヒドロ-5H-ベンゾシクロヘプテン-8-イル)カルボニル)アミノ)-ベンジル)-N-(4-テトラヒドロピラニル)アンモニウムクロライド (5 0 0 m g)、マンニトール (1 0 0 0 m g)、ポリソルベート 8 0 (1 0 0 m g) を溶解した後、日局注射用蒸留水を加えて 2 0 m l とする。この溶液を滅菌条件下でろ過し、次にこの溶液 0. 2 m l ずつを取り、滅菌条件下、注射用バイアルに充填し密閉する。

【 0 1 0 9 】

### 【発明の効果】

C C R 拮抗作用を有する化合物を含有してなる本発明の予防剤は、輸血時および血液製剤使用時における H I V 感染症予防に有利に用いられる。

【 0 1 1 0 】

### 【図面の簡単な説明】

【図 1】 実験例における化合物の H I V - 1 感染阻害率を示すグラフである。

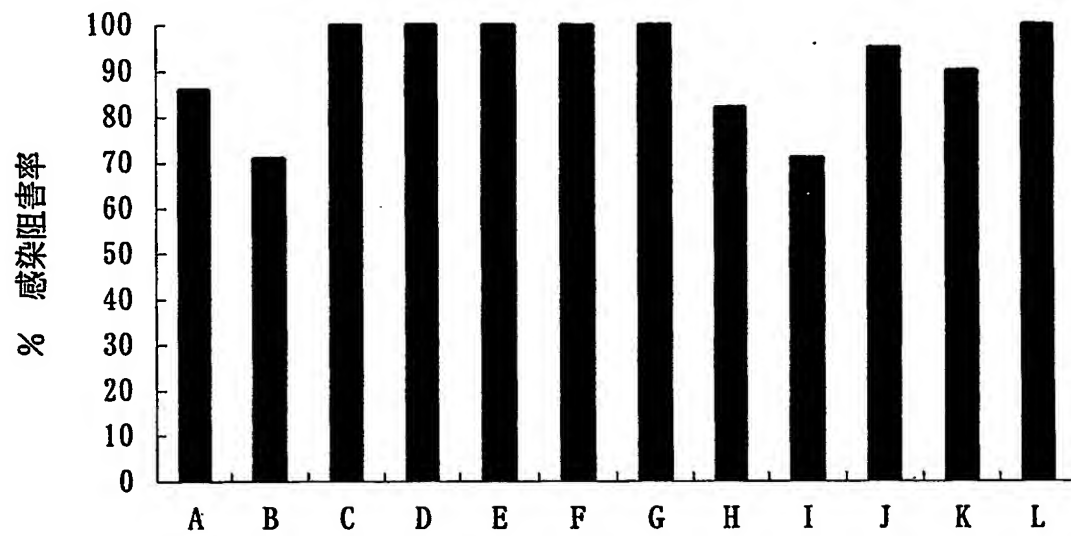




【書類名】

図面

【図 1】





【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 輸血時および血液製剤使用時におけるH I V感染症の予防において、  
優れた効果を発揮する新規薬剤の提供。

【解決手段】 C C R拮抗作用を有する化合物を含有することを特徴とする  
輸血時および血液製剤使用時におけるH I V感染症予防剤。

【選択図】 なし

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [000002934]

1. 変更年月日 1992年 1月22日

[変更理由] 住所変更

住 所 大阪府大阪市中央区道修町四丁目1番1号  
氏 名 武田薬品工業株式会社